

COMPARACION DE TECNICAS DE OPTIMIZACION EN PROCESOS MULTI-  
RESPUESTA PARA EL MEJORAMIENTO DE LA CALIDAD DE AGUA POTABLE  
MEDIANTE LA TECNOLOGIA DE OXIDACION AVANZADA PCFH EN EL  
DEPARTAMENTO DE NARIÑO

ADRIAN HIDALGO  
LEONEL DELGADO ERASO

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PERERIA  
UNIVERSIDAD DE NARIÑO  
MAESTRÍA EN INVESTIGACIÓN DE OPERACIONES Y ESTADISTICA  
SAN JUAN DE PASTO  
AGOSTO 2018

COMPARACION DE TECNICAS DE OPTIMIZACION EN PROCESOS MULTI-  
RESPUESTA PARA EL MEJORAMIENTO DE LA CALIDAD DE AGUA POTABLE  
MEDIANTE LA TECNOLOGIA DE OXIDACION AVANZADA PCFH EN EL  
DEPARTAMENTO DE NARIÑO

ADRIAN HIDALGO  
LEONEL DELGADO ERASO

TRABAJO PRESENTADO COMO REQUISITO PARA OPTAR AL TITULO DE  
MAGISTER EN INVESTIGACION DE OPERACIONES Y  
ESTADISTICA

DIRECTOR  
ARSENIO HIDALGO TROYA  
MAGISTER EN ESTADISTICA

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PERERIA  
UNIVERSIDAD DE NARIÑO  
MAESTRÍA EN INVESTIGACIÓN DE OPERACIONES Y ESTADISTICA  
SAN JUAN DE PASTO  
AGOSTO 2018

Nota de aceptación

---

Jurado 1

---

Jurado 2

---

Director de Tesis  
MSc: Arsenio Hidalgo Troya

---

Director Proyecto de Calidad de agua Udenar.  
PhD: Alejandro Galeano

## Tabla de Contenido

<b>RESUMEN .....</b>	<b>9</b>
<b>1. INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>10</b>
<b>2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....</b>	<b>12</b>
<b>3. ANTECEDENTES.....</b>	<b>13</b>
<b>4. OBJETIVOS .....</b>	<b>15</b>
4.1 OBJETIVO GENERAL .....	15
4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	15
<b>5. MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>16</b>
5.1 TÉCNICA DE PEROXIDACIÓN CATALÍTICA EN FASE HÚMEDA (PCFH) .....	16
5.2 SUPERFICIE DE RESPUESTA .....	17
5.3 TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN MULTIRESPUESTA .....	19
5.3.1 <i>Función de Deseabilidad (DF)</i> .....	19
5.3.2 <i>Función de Distancia Generalizada (GDF)</i> .....	23
5.3.3 <i>Análisis Envolvente de Datos (DEA)</i> .....	25
5.3.4 <i>Análisis de Componentes Principales. (PCA)</i> .....	27
5.3.5 <i>Redes Neuronales Artificiales (ANN)</i> .....	31
5.4 EL ERROR PORCENTUAL GLOBAL (GPE) .....	37
5.5 EL MÉTODO DE LAS DIRECCIONES FACTIBLES .....	37
<b>6. ANÁLISIS ESTADÍSTICO DE DATOS.....</b>	<b>39</b>
6.1 RECOPIACIÓN DE DATOS.....	39
6.2 RESUMEN ESTADÍSTICO.....	41
6.3 ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS INDIVIDUALES .....	43
<b>7. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>46</b>
7.1 APLICACIÓN DE LAS TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN MULTI-RESPUESTAS .....	46
7.1.1 <i>Función de Deseabilidad (DF)</i> .....	46

7.1.2	<i>Función de Distancias Generalizada (GDF)</i> .....	49
7.1.3	<i>Análisis Envolvente de Datos (DEA)</i> .....	52
7.1.4	<i>Análisis de Componentes Principales (PCA)</i> .....	57
7.1.5	<i>Redes Neuronales Artificiales (ANN)</i> .....	61
7.2	DISCUSIÓN .....	63
<b>8.</b>	<b>CONCLUSIONES</b> .....	<b>66</b>
<b>9.</b>	<b>RECOMENDACIONES</b> .....	<b>69</b>
<b>10.</b>	<b>REFERENCIA BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>71</b>
<b>ANEXO A</b>	.....	<b>75</b>
	DIAGRAMAS DE FLUJO APLICADOS A CADA METODOLOGÍA. ....	75
<b>ANEXO B</b> .....		<b>80</b>
	APLICACIÓN 2 .....	80
	APLICACIÓN 3 .....	82
<b>ANEXO C</b> .....		<b>84</b>

## Lista de Tablas

Tabla 1. Clasificación de redes neuronales.....	35
Tabla 2. Algoritmos de aprendizaje para Perceptrón Multicapa.....	36
Tabla 3. Diseño experimental mejoramiento calidad de agua. ....	40
Fuente: proyecto de investigación mejoramiento de calidad de agua UDENAR.....	40
Tabla 4. Diseño experimental mejoramiento calidad de agua (codificado).....	41
Tabla 5. Resumen estadístico variables respuesta .....	42
Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics .....	42
Tabla 6. Tabla de correlación para las variables respuesta.....	42
Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics .....	42
Figura 6. Matriz de correlación y gráficas de dispersión. Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics .....	43
Tabla 7. Estimación de parámetros individuales respuestas.....	43
Fuente: Realización propia paquete estadística Excel .....	43
Tabla 8. Estimación de respuestas .....	44
Fuente: Realización propia paquete estadística Excel .....	44
Fuente: Realización propia paquete estadística Excel .....	45
Tabla 9. Óptimos multirespuesta, método función de deseabilidad .....	49
Tabla 10. Óptimos multi-respuesta, función de distancia generalizada.....	52
Tabla 11. Óptimos multi-respuesta, método Análisis envolvente de datos supereficiencias .....	55
Tabla 12. Óptimos multirespuesta, método análisis envolvente de datos para las eficiencias .....	57
Tabla 13. Óptimos multi-respuesta, método análisis de componentes principales.....	60
Tabla 14. Óptimos multi-respuesta, método Redes Neuronales Artificiales .....	62
Tabla 15. Comparación de métodos multi-respuesta.....	63
Tabla a. Comparación de las diferentes técnicas de optimización multi-respuesta mediante el GPE (Error Porcentual Global) para “SLURRY”. ....	81

Tabla b. Comparación de métodos multi-respuesta para el ejercicio 7.5 de Khuri-Cornel, 1996.....	83
---	----

### **Lista de Figuras**

Figura 1. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización de maximización, Fuente: Realización propia. ....	20
Figura 2. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización de minimización. Fuente: Realización propia. ....	21
Figura 3. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización donde se debe alcanzar un objetivo. Fuente: Realización propia. ....	22
Figura 4. Esquema de Neurona artificial con varios input-outputs (McCulloch-Pitts)) ...	31
Figura 5. Método de Direcciones Factibles. Fuente: Realización propia. ....	38



## **Resumen**

En este trabajo se presenta una breve descripción de las diferentes técnicas de optimización multi-respuesta: función de deseabilidad (DF), Función de distancia generalizada (GDF), Análisis Envolvente de datos (DEA), Análisis de componentes principales (PCA) y redes neuronales artificiales (ANN). Se hace la aplicación de cada técnica a diseños centrales compuestos rotatables  $2^k$  obtenidos en laboratorios en la investigación de la UDENAR sobre el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la Tecnología de Oxidación Avanzada (PCFH) en el Departamento de Nariño. Inicialmente se aplican modelos de regresión múltiple para estimar las relaciones entre cada respuesta y los factores controlables, luego se combinan las diferentes respuestas usando las técnicas de optimización multirespuesta planteadas para optimizar cada función mediante el método de las direcciones factibles empleando MATLAB. Para cada técnica se evaluará la eficiencia mediante el error porcentual global (GPE) con el fin de determinar el conjunto de valores de los factores controlables que permitan la mejor combinación de respuestas para el mejoramiento de la calidad de agua en diseños centrales compuestos en el proyecto de la calidad de agua en el Departamento de Nariño que desarrolla la Universidad de Nariño.

## **1. Introducción**

“En el Departamento de Nariño, se evidencian algunas deficiencias en la calidad del agua potable suministrada a la población, no solo en aquellas zonas que por su difícil acceso no cuentan con las mínimas condiciones de tratamiento, sino también en aquellas cuyas plantas de tratamiento requieren modernizar y mejorar los sistemas de potabilización, bajo este contexto, el Instituto Departamental de Salud de Nariño -IDSN, viene realizando la vigilancia del 100% de los acueductos en Nariño, logrando identificar que el 77,5% de la población tiene acceso a sistemas de acueducto y que tan solo el 28% cuenta con el suministro de agua apta para el consumo humano” (Instituto Departamental de Salud de Nariño - IDSN, 2013).

“Estas deficiencias se deben principalmente a la presencia de cada vez mayores concentraciones de Materia Orgánica Natural (MON) en las fuentes de abastecimiento, a la formación de Subproductos de Desinfección (SPDs) nocivos para la salud y al uso de métodos convencionales de desinfección con cloro que pueden resultar inefficientes en la eliminación de algunos agentes patógenos resistentes y que dan lugar al desarrollo de importantes problemas sanitarios, ambientales y de salud pública. De otro lado, la normatividad reciente ha endurecido seriamente las medidas para la protección y el control de calidad del agua para consumo humano, por lo tanto, es de particular importancia y urgencia, la implementación por parte de los operadores de los acueductos de nuevas tecnologías de desinfección que garanticen mejorar los índices de calidad y el suministro de agua. Igualmente, las soluciones deben ser capaces de operar a bajo costo y ser fácilmente desplazadas a zonas apartadas de los cascos urbanos, veredas y zonas rurales donde se requiera el tratamiento”. (Galeano 2016, pg. 12)

La presente propuesta comparará métodos de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales

Artificiales (ANN) aplicados a la Tecnología de Oxidación Avanzada (TOA), denominada Peroxidación Catalítica en Fase Húmeda (PCFH), como alternativa tecnológica para diseños centrales compuestos en el mejoramientos de los sistemas de tratamiento en la producción de agua para el consumo humano en el Departamento de Nariño. Se contempla la adaptación de la TOA de manera que resulte acoplable a los sistemas de acueductos ya existentes o que puedan operar como planta compacta en las zonas apartadas donde no hay sistema de potabilización convencional y que así lo requieran. (Galeano 2016, pg. 13).

## **2. Planteamiento del Problema**

Con el fin de mejorar los sistemas de tratamiento en la producción de agua para el consumo humano en el Departamento de Nariño la tecnología PCFH presenta como una de sus principales ventajas la baja selectividad de ataque, es decir alto poder de eliminación de un amplio espectro de sustancias orgánicas, lo que permitiría eliminar al mismo tiempo materia orgánica, color orgánico e incluso patógenos. Si bien la PCFH con catalizadores Al/Fe PILC han mostrado alta eficiencia en la eliminación de materia orgánica natural y sintética, hace falta evaluar el efecto simultaneo de los factores que más influyen sobre la eficiencia de la reacción ( pH, concentración de agente oxidante, cantidad de catalizador , concentración de sustrato, etc), con el fin de optimizar su respuesta más apropiada.

De acuerdo a lo anterior se hace necesario contar con un análisis de optimización multi-respuesta que permita obtener los mejores resultados para el mejoramiento de la calidad en cada efluente en particular, Por tanto, en el presente trabajo se aplicaran las técnicas de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales Artificiales (ANN). De cada técnica se evaluará la eficiencia mediante el Error Porcentual Global (GPE) con el fin de determinar el conjunto de valores de los factores controlables que permitan la mejor combinación de respuestas para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH.

### **3. Antecedentes**

El presente estado revisa algunos ejemplos relevantes de la bibliografía, que permite identificar a manera general la atención investigativa y analíticas en los últimos años del tema sobre la aplicación de la tecnología de oxidación avanzada (PCFH), para mejorar la calidad de agua potable en el departamento de Nariño. Como parte importante a este tema se complementa con las diferentes técnicas estadísticas aplicadas a la optimización de la calidad del agua, haciendo énfasis en la comparación de los métodos de respuestas múltiples aplicando funciones de deseabilidad en la metodología de superficies de respuesta para la optimización en química analítica y el uso de redes neuronales artificiales para el modelado.

Juan Cevallos Ampuero en diciembre de 2004 en su artículo Aplicación de redes neuronales para optimizar problemas multirespuesta en mejora de la calidad, Realiza revisión sobre problemas multirespuesta y solución estadística y lo compara con un problema multirespuesta y solución con redes neuronales.

En el año 2012 Jorge Domínguez Domínguez en su artículo titulado Optimización estadística de procesos multi-respuesta realiza diferentes planteamientos de optimización multi-respuesta: Función de deseabilidad, Modelo de optimización mult-objetivo difuso, Función de distancia generalizada, función de pérdida múltiple, aplicadas a la elaboración de un queso y la otra en el mejoramiento del desempeño en las bandas de las llantas.

Luego Juan Cevallos Ampuero en febrero de 2013 en el artículo con título optimización multirespuesta para mejora de la calidad. Comparación de enfoque clásico con el enfoque bayesiano y el de redes neuronales. Realiza revisión sobre metodologías existentes para la optimización multirespuesta e integrarlas en una sola. Usando metodologías de superficie de respuesta tradicional, con diseño robusto; seguidamente una aplicación del enfoque bayesiano a lo obtenido con la estadística tradicional y finalmente se revisaron

aplicaciones de redes neuronales artificiales y compara sus respuestas con las obtenidas por diferentes autores

En el año 2015, Anderson P. Paiva y et al en el artículo Comparing DEA and principal component analysis in the multiobjective optimization of P-GMAW process compara dos enfoques en las entradas y salidas múltiples en la evaluación de unidades de toma de decisiones (DMUs) mediante Análisis Envolvente de Datos (DEA) y Análisis de Componentes Principales (PCA).

Posteriormente, Na Li, Yi Hu et al en el artículo titulado Multiple response optimization of the coagulation process for upgrading the quality of effluent from municipal wastewater treatment plant, desarrollan un método de optimización multirespuestas mediante un diseño experimental para mejorar la calidad del efluente de una depuradora de plantas de tratamiento de aguas residuales en china.

En el presente trabajo se aplicaran las técnicas de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales Artificiales (ANN). De cada técnica se evaluará la eficiencia mediante el Error Porcentual Global (GPE) con el fin de determinar el conjunto de valores de los factores controlables que permitan la mejor combinación de respuestas para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH.

Ante la imposibilidad de hacer una revisión exhaustiva de la bibliografía disponible, nos hemos centrado en los documentos que se presentan detalladamente en el anexo C que resultan ser puntos de confluencia conceptual e investigativa de la situación desde diversas perspectivas, y por ende que pueden servir como base para búsquedas en trabajos posteriores.

## **4. Objetivos**

### **4.1 Objetivo General**

Comparar técnicas de optimización en proceso de multi-respuesta para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH en el Departamento de Nariño.

### **4.2 Objetivos Específicos**

- Aplicar las técnicas de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales Artificiales (ANN) para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH.
- Estudiar y definir las eficiencias en los procesos de optimización multi-respuesta a través del Error Porcentual Global (GPE).
- Evaluar la eficiencia de las técnicas: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales Artificiales (ANN). a través del Error Porcentual Global (GPE).

## **5. Marco Teórico**

En el presente capítulo se presentan las herramientas teóricas básicas necesarias para poder realizar la optimización conjunta de las características del objetivo de la investigación, se inicia con una introducción a la metodología PCFH y una breve descripción de Superficie de Respuesta. Además, se presentan las diferentes técnicas multi-respuesta propuestas en el presente trabajo, y el indicador GPE lo cual permite evaluar la eficiencia de cada técnica.

### **5.1 Técnica de Peroxidación Catalítica en Fase Húmeda (PCFH)**

La oxidación Fenton realizada con catalizadores sólidos ha sido denominada por algunos autores desde hace algo más de una década como Peroxidación Catalítica en Fase Húmeda (PCFH o CWHPO, por sus siglas en inglés) En el Procesos de Oxidación Avanzada(POA), la activación del peróxido de hidrógeno se lleva a cabo con materiales sólidos en los cuales los metales activos, Fe y Cu principalmente, se inmovilizan en matrices que garanticen simultáneamente una alta actividad y una elevada estabilidad frente a la lixiviación química, mientras se amplía notablemente el intervalo operativo de pH respecto a la reacción de Fenton en fase homogénea. La reacción procede con alta eficiencia incluso bajo condiciones muy suaves de presión y temperatura, como son las atmosféricas, y el proceso se puede implementar muy fácilmente sin demandar elevada inversión para su instalación. Por lo tanto, de todos los procesos de oxidación avanzada, la PCFH es una de las tecnologías con mayor potencial desde el punto de vista técnico-económico en el tratamiento de diversos efluentes contaminantes. En la PCFH, como en otros POAs, existen numerosos parámetros de reacción que juegan un papel preponderante sobre el proceso catalítico. Influyen de manera importante el pH de reacción, la temperatura, el tiempo, la dosis de agente oxidante, la carga y tipo de catalizador, la naturaleza de los sustratos orgánicos a ser tratados, la concentración de los mismos, la forma iónica o neutra que adopten en disolución en las condiciones de pH, la superficie específica y distribución de porosidad del catalizador empleado, y la afinidad



entre los sustratos orgánicos y la superficie del catalizador. Esto conlleva que la puesta a punto de estas tecnologías en el tratamiento de un efluente dado requiera un elevado número de experimentos. (Galeano, 2016, pg.14)

## 5.2 Superficie de Respuesta

La metodología de superficie de respuesta (MSR) tiene como objetivo optimizar la(s) variable(s) de interés determinando las condiciones óptimas de operación del sistema, mediante un conjunto de técnicas matemáticas y estadísticas que se utilizan para modelar y analizar problemas en donde las variables de interés son determinadas por otras conocidas como factores.

La respuesta conocida como función de respuesta se puede representar mediante una ecuación polinomial, dicha respuesta debe ajustarse a un polinomio de primer o segundo grado para que la metodología sea exitosa.

En la mayoría de problemas de MSR se desconoce la forma de la relación entre la respuesta y las variables independientes (factores) . Por ello, el primer paso es determinar una aproximación apropiada a la relación funcional real entre la variable dependiente y las variables independientes. Por lo general se emplea un polinomio de orden bajo sobre alguna región de las variables independientes. Si la respuesta es descrita adecuadamente por una función lineal de las variables independientes, la función de aproximación es el modelo de primer orden [Cornell 1990]:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad (1)$$

Los parámetros del modelo se estiman mediante el método de mínimos cuadrados. Una vez se obtienen los estimadores se sustituyen la ecuación y obtenemos un modelo ajustado [Cornell 1990]

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k \quad (2)$$

Modelo utilizado para estudiar el comportamiento de la variable de respuesta únicamente en la región y se desconoce la forma de la superficie. Cuando existe curvatura en el sistema se requiere usar un modelo de segundo orden:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_i \sum_j \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon, , i < j \quad (3)$$

Casi todos los problemas de MSR usan uno o ambos polinomios de aproximación. Estos polinomios funcionan muy bien en regiones relativamente pequeñas. El método de mínimos cuadrados sirve para estimar los parámetros de los polinomios de aproximación. Como primer paso en la MSR se debe de hacer un cribado cuando se tienen muchos factores que pueden influir en la respuesta o característica de interés, esto con el fin de identificar los factores que tienen influencia efectiva en la variable de respuesta. Una vez que los factores relevantes del proceso se tienen identificados se trabaja con un modelo y un diseño de primer orden que permita detectar la presencia de curvatura en la respuesta. Si se detecta curvatura se debe de utilizar un diseño de segundo orden con el que se pueda modelar adecuadamente la curvatura de la superficie de respuesta. Cabe recalcar que el número de experimentos y de etapas que se requieren depende del conocimiento que se tenga al comenzar la investigación, en relación a cómo pueden influir los factores que intervienen en cierto proceso. Puede ser que por experiencia anterior ya se conozcan los factores de mayor influencia, e inclusive puede ser que ya se sepa que sí existe la curvatura. Cuando no se ha detectado curvatura (la superficie es ajustada por un plano) entonces el objetivo del experimento es explorar una nueva región cuya dirección óptima de movimiento se obtiene mediante la técnica conocida como escalamiento ascendente (o descendiente, según se requiera maximizar o minimizar la respuesta). Si la superficie es curva (ajustada por un modelo de segundo orden) el objetivo es, en caso de que exista y esté dentro de la región experimental, determinar el punto óptimo o bien, el mejor punto de operación posible dentro de la región experimental. En este último caso las técnicas de optimización del proceso son el análisis canónico y el análisis de cordillera, se puede

decir que MSR consiste en tres pasos clave: Diseño, Modelación y Optimización. (Derringer et. al. 1980).

En la MSR múltiples se requiere primero construir un modelo de superficie de respuesta apropiado para cada respuesta y después intentar encontrar un conjunto de condiciones de operación que optimice o brinde la mejor respuesta posible del conjunto de variables o características de calidad.. Otro enfoque útil para la optimización de múltiples respuestas es usar la técnica de optimización simultánea propuesta por (Derringer et. al. 1980). En este trabajo aplicaremos cinco técnicas de optimización multi-respuesta que se explican a continuación.

### **5.3 Técnicas de Optimización Multirespuesta**

#### **5.3.1 Función de Deseabilidad (DF)**

Derringer y Suich proponen la Función de Deseabilidad para la optimización de múltiples respuestas la cual se ha utilizado ampliamente en la industria (Derringer y Suich.1980). El objetivo de esta función es encontrar condiciones operativas donde se garantice que todas las respuestas cumplan con los criterios “deseables” establecidos por el investigador y que proporcione un óptimo multi-respuesta que se aleje lo menos posible de las respuestas individuales (Meyers y Montgomery 2009).

Se debe crear funciones de deseabilidad para cada respuesta  $d_i[\hat{y}_i(x)]$ . Para ello se debe ajustar los modelos de regresión para cada  $y_i(x)$  y transformar las estimaciones  $\hat{y}_i(x)$ , a valores en el intervalo  $[0, 1]$ . Si  $d_i[\hat{y}_i(x)] = 0$  es un valor “indeseable” y si  $d_i[\hat{y}_i(x)] = 1$  es el valor más “deseable”, los valores intermedios indican valores “más o menos deseables”. (Derringer et. al. 1980)

Dependiendo de los criterios de optimización adoptados, se pueden construir diferentes funciones dentro de un intervalo aceptable de valores de respuesta dado por  $(U_i, L_i)$ , donde  $U_i$  es el valor superior aceptable para la respuesta y  $L_i$  es la más baja (Vera et. al, 2014). Por lo tanto, si la respuesta tiene que ser *maximizada*,  $d_i[\hat{y}_i(x)]$  se describe por la siguiente ecuación :

$$d_i[\hat{y}_i(x)] = \begin{cases} 0 & \text{si } \hat{y}_i(x) < L_i \\ \left( \frac{\hat{y}_i(x) - L_i}{U_i - L_i} \right)^s & \text{si } L_i \leq \hat{y}_i(x) \leq U_i \\ 1 & \text{si } \hat{y}_i(x) > U_i \end{cases} \quad (4)$$

donde  $s$  es un valor de potencia denominado "peso", establecido por el analista para determinar la importancia de que  $\hat{y}_i$  esté cerca del máximo. Para valores pequeños de  $s$  se alcanza niveles satisfactorios de deseabilidad y para valores grandes de  $s$  la deseabilidad disminuye.

En la siguiente gráfica se puede observar la forma que toma  $d_i[\hat{y}_i(x)]$  dependiendo de los valores de  $s$ .

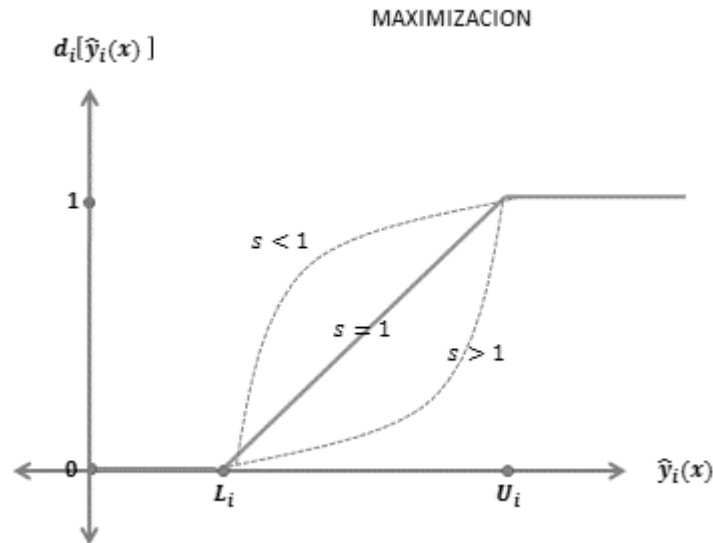


Figura 1. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización de maximización, Fuente: Realización propia.

La ecuación para  $d_i[\hat{y}_i(x)]$ , cuando tiene que ser *minimizada*, es

$$d_i[\hat{y}_i(x)] = \begin{cases} 1 & \text{si } \hat{y}_i(x) < L_i \\ \left(\frac{\hat{y}_i(x) - U_i}{L_i - U_i}\right)^t & \text{si } L_i \leq \hat{y}_i(x) \leq U_i \\ 0 & \text{si } \hat{y}_i(x) > U_i \end{cases} \quad (5)$$

donde,  $t$  es un valor de potencia denominado "peso", establecido por el analista para determinar la importancia de que  $\hat{y}_i$  esté cerca del mínimo. Para valores pequeños de  $t$  se alcanza niveles satisfactorios de deseabilidad y para valores grandes de  $t$  la deseabilidad disminuye.

En la siguiente gráfica se puede observar la forma que toma  $d_i[\hat{y}_i(x)]$  dependiendo de los valores de  $t$ .

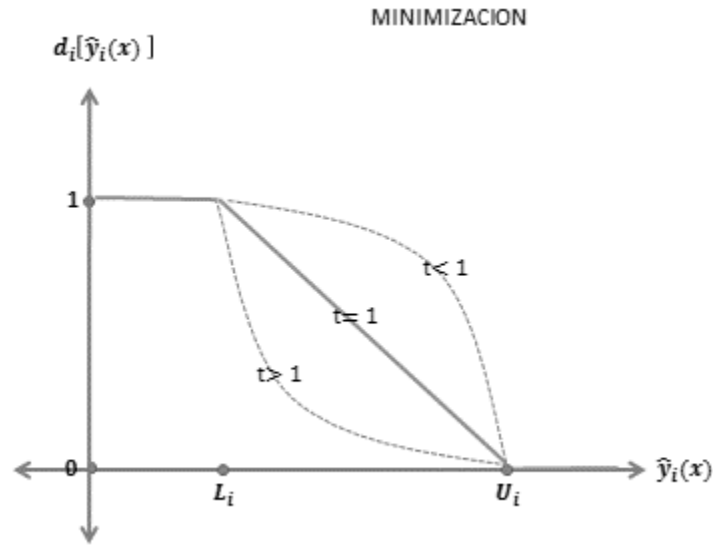


Figura 2. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización de minimización. Fuente: Realización propia.

Cuando un valor objetivo  $\theta_i$  es la respuesta más deseable, la ecuación viene dada por

$$d_i[\hat{y}_i(x)] = \begin{cases} 0 & \text{si } \hat{y}_i(x) < L_i \\ \left(\frac{\hat{y}_i(x)-L_i}{\theta_i-L_i}\right)^s & \text{si } L_i \leq \hat{y}_i(x) < \theta_i \\ 1 & \text{si } \hat{y}_i(x) = \theta_i \\ \left(\frac{\hat{y}_i(x)-U_i}{\theta_i-U_i}\right)^t & \text{si } \theta_i < \hat{y}_i(x) \leq U_i \\ 0 & \text{si } \hat{y}_i(x) > U_i \end{cases} \quad (6)$$

Nótese, que también se pueden establecer valores de  $t$  y  $s$  con el fin de priorizar el uso de condiciones adecuadas dentro de la región experimental. (En este trabajo para los ejemplos de aplicación ambos valores los consideraremos iguales a 1).

En la siguiente gráfica se puede observar la forma que toma  $d_i[\hat{y}_i(x)]$  dependiendo de los valores de  $t$  y  $s$

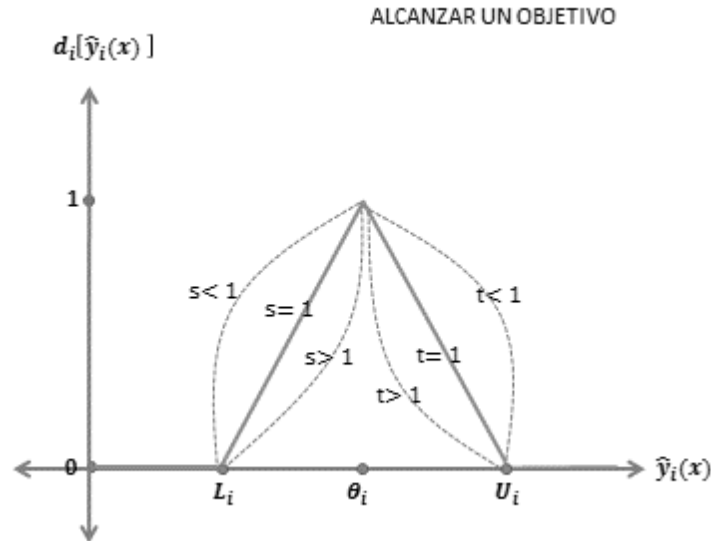


Figura 3. Representación gráfica de las funciones de deseabilidad para criterios de optimización donde se debe alcanzar un objetivo. Fuente: Realización propia.

Después de transformar cada variable respuesta a unas funciones de deseabilidad según el criterio de optimización establecido en el diseño, se combinan en una función única (Derringer et. al, 1980) llamada Deseabilidad Global (D), la cual corresponde a una media geométrica de los funciones de deseabilidad individuales.

$$D = (d_1^{r_1} * d_2^{r_2} * ... * d_n^{r_n})^{\frac{1}{\sum r_i}} = \left( \prod_{i=1}^m d_i^{r_i} \right)^{\frac{1}{\sum r_i}} \quad (8)$$

donde  $r_i$  es la importancia de cada variable con respecto a las otras,  $r_i$  toma valores entre 1 y 5, valores cercanos a 1 para las menos importantes y valores cercanos a 5 para las respuestas más importantes.

Una vez que se calcula la Deseabilidad Global (D) para cada tratamiento en un diseño DCC, esta variable de respuesta múltiple única, se utiliza como variable respuesta y se obtiene mediante el proceso de mínimos cuadrados una función que la llamaremos función de DESEABILIDAD. Se procede a optimizar esta función usando el método de las direcciones factibles usando el comando “fmincon” de MATLAB.

El éxito de alcanzar un óptimo multi-respuesta mediante la función de deseabilidad depende de la calidad de los modelos de estimación que se utilizaron para construir las respuestas deseables individuales. Estos modelos deben ser estadísticamente significativos. (Vera et.al, 2014)

### 5.3.2 Función de Distancia Generalizada (GDF)

El enfoque de la función de distancia generalizada fue introducido por Khuri y Conlon, 1981, usando la definición de distancia de Mahalanobis y la matriz de varianzas-covarianzas para las variables respuestas.

De Wang-Li, 2016 tomamos la definición de GDF así:

“La matriz de varianza-covarianza  $\Sigma$  es:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 & \dots & \rho_{1m}\sigma_1\sigma_m \\ \rho_{21}\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 & \dots & \rho_{2m}\sigma_2\sigma_m \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ \rho_{m1}\sigma_m\sigma_1 & \rho_{m2}\sigma_m\sigma_2 & \dots & \sigma_m^2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

Un estimador insesgado de  $\Sigma$  puede calcularse mediante la fórmula

$$\hat{\Sigma} = \frac{(Y - \hat{Y})^t (Y - \hat{Y})}{n - p} = \frac{Y^t [I_n - X(X^t X)^{-1} X^t] Y}{n - p} \quad (10)$$

donde,  $\hat{Y}$  es el estimador insesgado de  $Y$ , matriz formada por las variables respuestas, y  $\hat{\Sigma}$  es una matriz  $m \times m$ .

La varianza de cada  $\hat{y}_i(x)$  es:

$$\text{var}[\hat{y}_i(x)] = \mathbf{z}^t(x) (X^t X)^{-1} \mathbf{z}(x) \sigma_i^2, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (11)$$

y las covarianzas entre  $\hat{y}_i(x)$  y  $\hat{y}_j(x)$  son:

$$\text{cov}[\hat{y}_i(x), \hat{y}_j(x)] = \mathbf{z}^t(x) (X^t X)^{-1} \mathbf{z}(x) \rho_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad i \neq j = 1, 2, \dots, m \quad (12)$$

donde  $\rho_{ij} \sigma_i \sigma_j$  es el elemento  $(i, j)$  – ésimo de la matriz de varianza-covarianza  $\Sigma$ , y  $\mathbf{z}^t(x) = (1, x_1, x_2, \dots, x_k, x_1^2, x_2^2, \dots, x_k^2, x_1 x_2, x_1 x_3, \dots, x_{k-1} x_k)$ , es un vector fila de dimensión  $1 \times p$  y  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_k]^t$  es un vector de columna  $k \times 1$

Si  $\hat{\mathbf{y}}(x) = [\hat{y}_1(x), \hat{y}_2(x), \dots, \hat{y}_m(x)]^t$  el vector  $m \times 1$  de las respuestas estimadas en el punto  $x$ . La matriz varianza-covarianza  $m \times m$  para  $\hat{\mathbf{y}}$  en el punto  $x$  es:

$$\text{var}[\hat{\mathbf{y}}(x)] = \mathbf{z}^t(x) (X^t X)^{-1} \mathbf{z}(x) \Sigma \quad (13)$$

Un estimador insesgado de  $\text{var}[\hat{\mathbf{y}}(x)]$  viene dado por la ecuación (13) con  $\hat{\Sigma}$  sustituido por  $\Sigma$ .

Sea  $\theta_i$  el valor objetivo o valor óptimo ideal de  $\hat{y}_i$ , sea  $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m]^t$  el vector  $m \times 1$  de valores objetivo o ideal óptimo para las respuestas. La función de distancia generalizada en el espacio euclidiano  $m$ -dimensional es :

$$\rho[\hat{\mathbf{y}}(x), \boldsymbol{\theta}] = [(\hat{\mathbf{y}}(x) - \boldsymbol{\theta})^t \{\text{var}[\hat{\mathbf{y}}(x)]\}^{-1} (\hat{\mathbf{y}}(x) - \boldsymbol{\theta})]^{1/2} \quad (14)$$



Puesto que  $\mathbf{var}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]$  es definida positiva,  $\{\mathbf{var}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]\}^{-1}$  también se define positiva, y la distancia es estrictamente positiva cuando  $\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) \neq \boldsymbol{\theta}$ . El requisito definido positivo sobre  $\{\mathbf{var}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]\}^{-1}$  también implica simetría para la función de distancia. Reemplazando  $\mathbf{var}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x})]$  en la ecuación (14) por su estimador, la función de distancia generalizada puede obtenerse por:

$$\hat{\rho}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\theta}] = \left[ \frac{(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\theta})^t \hat{\Sigma}^{-1} (\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\theta})}{\mathbf{z}^t(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{z}(\mathbf{x})} \right]^{1/2} \quad (15)$$

Este método da una medida de la cercanía a los valores objetivo o ideal óptimo. El valor óptimo multi-respuesta de  $\mathbf{x}$  puede obtenerse minimizando la distancia  $\hat{\rho}[\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\theta}]$  sobre la región experimental”.

### 5.3.3 Análisis Envolvente de Datos (DEA)

El Análisis envolvente de datos es una técnica de optimización que utiliza modelos de programación lineal para calcular la eficiencia de un conjunto de Unidades de Toma de Decisión (DMUs). La eficiencia relativa de una DMU es la suma ponderada de las salidas entre la suma ponderada de las entradas (16), en un modelo DEA, CCR (Charnes et al, 1978)

Para usar DEA en un diseño central compuesto rotatable  $2^k$  se debe considerar las respuestas que maximizan como salidas y las respuestas que minimizan como entradas.

$$E_{ks} = \frac{\sum_y o_{sy} u_{ky}}{\sum_x I_{sx} v_{kx}} \quad (16)$$

donde  $E_{ks}$  es la medida de eficiencia para cada experimento  $\mathbf{s}$ , usando los pesos del experimento evaluado  $k$ ;  $O_{sy}$  los valores de la producción  $\mathbf{y}$  para el experimento  $\mathbf{s}$ ;  $I_{sx}$  los valores de la entrada  $\mathbf{x}$  para el experimento  $\mathbf{s}$ ;  $u_{ky}$  los pesos asignados al experimento

$k$  para la producción  $y$ ;  $v_{kx}$  los pesos asignados al experimento de ensayo  $k$  para la entrada  $x$ .

La maximización de la relación entre la suma de las salidas y entradas de la DMU ponderada conduce a una mayor eficiencia.

Las eficiencias para cada tratamiento se calculan mediante el siguiente modelo de programación no lineal propuesto por Charnes-Cooper-Rhodes dirigido a las entradas

$$\begin{aligned} \max E_{kk} &= \frac{\sum_y o_{ky} u_{ky}}{\sum_y I_{ky} v_{ky}} \\ s. t.: \quad &\sum_y o_{ky} u_{ky} - \sum_y I_{ky} v_{ky} \leq 0. \quad \forall s \quad (17) \\ &u_{ky}, v_{ky} \geq 0 \end{aligned}$$

La Ecuación (17) puede escribirse en una formulación de programación lineal, como se describe en la Ecuación (18), estableciendo su denominador igual a 1 “uno” y maximizando su numerador.

$$\begin{aligned} \max E_{kk} &= \sum_y o_{ky} u_{ky} \\ s. t.: \quad &\sum_y I_{ky} v_{ky} = 1 \\ &\sum_y o_{ky} u_{ky} - \sum_y I_{ky} v_{ky} \leq 0. \quad \forall s \quad (18) \\ &u_{ky}, v_{ky} \geq 0 \end{aligned}$$

El resultado de la formulación (18) es un valor de eficiencia óptimo ( $E^*_{kk}$ ) que es como máximo igual a la unidad. Cuando  $E^*_{kk} = 1$ , ningún otro experimento es más eficiente que el experimento  $k$  bajo sus pesos seleccionados.

Una vez que se calcula la eficiencia para cada tratamiento en un diseño DCC, este índice de respuesta múltiple se utiliza como variable dependiente (Souza et. al. 2015) y se obtiene mediante el proceso de mínimos cuadrados una función que la llamaremos

función *EFICIENTE*. Se procede a optimizar esta función usando el método de las direcciones factibles usando el comando “fmincon” de MATLAB.

La *SUPEREFICIENCIA* se obtiene eliminando en el modelo (18), la restricción DMU correspondiente con eficiencia igual a 1. Es decir, si  $E^*_{kk} = 1$ , se calcula la supereficiencia eliminando de (18) la restricción para la  $DMU_k$ , se obtiene el siguiente modelo de programación lineal:

$$\begin{aligned}
 \max E_{kk} &= \sum_y o_{ky} u_{ky} \\
 s. t.: &\sum_y I_{ky} v_{ky} = 1 \\
 \sum_y o_{ky} u_{ky} - \sum_y I_{ky} v_{ky} &\leq 0. \quad \forall s \neq k \\
 u_{ky}, v_{ky} &\geq 0
 \end{aligned} \tag{19}$$

Para emplear DEA en un problema de optimización de respuestas múltiples Souza et. al, 2015 advierten que la respuesta debe ser estandarizada. Para estandarizar con máximos y mínimos se usa la expresión:

$$Z_{ij} = \frac{Y_{ij} - \min\{Y_{ij}, j = 1, 2, \dots, n\}}{\max\{Y_{ij}, j = 1, 2, \dots, n\} - \min\{Y_{ij}, j = 1, 2, \dots, n\}} \tag{20}$$

para  $i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n.$

donde  $Y_{ij}$  es una observación para la i-ésima ( $i = 1, 2, \dots, m$ ) respuesta en la j-ésima ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) factor / nivel de combinación, su valor estandarizado  $Z_{ij}$  ( $0 \leq Z_{ij} \leq 1$ ) no tiene unidades.

### 5.3.4 Análisis de Componentes Principales. (PCA)

“Los objetivos más importantes de todo análisis por componentes principales son: Generar nuevas variables que puedan expresar la información contenida en el conjunto

original de datos. Reducir la dimensionalidad del problema que se está tratando. Eliminar, cuando sea posible, algunas de las variables originales ya sea porque ellas aportan poca información o porque una variable contiene en parte información ya suministrada por otra variable” (García. Udenar. 2017).

“Las nuevas variables generadas se denominan componentes principales que son combinaciones lineales de las variables originales y no están correlacionadas entre ellas. El estudio se centra en los componentes que sintetizan la mayor variabilidad del sistema de puntos” (García , Udenar. 2017).

Para calcular los componentes principales aplicados a las variables respuestas, estandarizamos cada respuesta con los máximos y mínimos según indica la ecuación (20) y luego la estandarizamos con la media y la desviación estándar de cada respuesta. Posteriormente se calcula la matriz de correlación junto con sus valores propios y vectores propios.

El primer componente principal aplicado a las variables respuestas se define como la combinación lineal de las variables originales que tienen varianza máxima (Peña D. 2002)

Los valores en este primer componente de los  $n$  tratamientos se representarán por un vector **PC1**, dado por:

$$PC1 = Y \cdot a_1 \quad (21)$$

donde  $Y$  es la matriz de dimensión  $n \times m$  y  $a_1$  es el vector propio asociado al mayor valor propio calculado con la matriz de correlación.

El segundo componente principal será :

$$PC2 = Y \cdot a_2 \quad (22)$$

Los demás compones se calculan de forma semejante. El último componente principal se calcula con el vector propio asociado al menor valor propio calculado con la matriz de correlación

### Propiedades de los componentes principales

Conservan la misma variabilidad inicial: La suma de las varianzas de los componentes es igual a la suma de las varianzas de las variables originales

$$\text{traza}(\mathbf{S}) = \text{var}(x_1) + \text{var}(x_2) + \cdots + \text{var}(x_p) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots \lambda_p \quad (23)$$

donde  $\mathbf{S}$  es la matriz de correlación.

La proporción de variabilidad explicada por un componente es el cociente entre su varianza (valor propio asociado al vector propio que lo define), y la suma de los valores propios de la matriz.

La proporción de la variabilidad total explicada por el componente  $j$  es:

$$\frac{\lambda_j}{\sum \lambda_j} \quad (24)$$

### Selección del número de componentes

Se han sugerido distintas reglas para seleccionar el número de componentes:

- Realizar un gráfico de  $\lambda_j$  frente a  $j$ . Comenzar seleccionando componentes hasta que los restantes tengan aproximadamente el mismo valor de  $\lambda_j$ . La idea es buscar un “codo” en el gráfico, es decir, un punto a partir del cual los valores propios son aproximadamente iguales. El criterio es quedarse con un número de componentes que excluya los asociados a valores pequeños y aproximadamente del mismo tamaño. (Gráfico de sedimentación) (Peña D. 2002)
  
- Seleccionar componentes hasta cubrir una proporción determinada de varianza, como el 80% o el 90%. Esta regla es arbitraria y debe aplicarse con cierto cuidado. Por ejemplo, es posible que un único componente de “tamaño” recoja el 90% de la variabilidad y, sin embargo, pueden existir otros componentes que sean muy adecuados para explicar la “forma” de las variables. (Peña D. 2002)

- Desechar aquellos componentes asociados a valores propios inferiores a una cota, que suele fijarse como la varianza media,  $\sum \left( \frac{\lambda_i}{p} \right)$ . En particular, cuando se trabaja con la matriz de correlación, el valor medio de los componentes es 1, y esta regla lleva a seleccionar los valores propios mayores que la unidad. De nuevo esta regla es arbitraria: una variable que sea independiente del resto suele llevarse un componente principal y puede tener un valor propio mayor que la unidad. Sin embargo, si esta incorrelada con el resto puede ser una variable poco relevante para el análisis, y no aportar mucho a la comprensión del fenómeno global. (Peña, 2002).

Determinados los componentes principales se obtiene una sola medida ponderando los componentes principales en términos de la información sobre los valores propios. Paiva 2006 establece un Índice Global Multivariado, MGI

$$MGI = \sum_{i=1}^l [\pm \lambda_i (PCsi)] \quad (25)$$

donde  $l$  es el número de componentes principales seleccionados, y el signo para cada valor propio se determina según el porcentaje de negativos en el vector propio correspondiente.

Con (25) se obtiene una variable respuesta única MGI y se optimiza en la región experimental, mediante el siguiente modelo de programación no lineal

$$\begin{aligned} \text{Maximizar } MGI &= \sum_{i=1}^l [\pm \lambda_i (PCsi)] \\ (26) \end{aligned}$$

$$\text{Sujeto a: } x^T x \leq \rho^2$$

donde  $\rho = \alpha = \sqrt[4]{2^k}$  para un diseño central compuesto rotatable  $2^k$ , con k factores.

El punto donde se optimiza esta función es el punto donde se optimizan las funciones estimadas de las respuestas.

Una transformación del método, primero se define algunas nuevas medidas por cada variable respuesta que maximiza y cada variable respuesta que minimiza, es decir, definimos las relaciones de salida/entrada individuales para cada DMU propuesta en DEA y a continuación se determinan los componentes principales de estas nuevas variables respuestas y calculamos el MGI

### 5.3.5 Redes Neuronales Artificiales (ANN)

Las redes neuronales reproducen el funcionamiento del complejo cerebro humano, inspirado en las redes neuronales biológicas mediante un modelo matemático que se conoce como red neuronal artificial (ANN). La característica esencial de las redes neuronales artificiales es que son capaces de aprender, independientemente del tipo o de la estructura de la red. En una red neuronal las neuronas se combinan, dando lugar a los diferentes tipos de redes que existen. (Cevallos,2008).

La actividad que una neurona artificial realiza consiste en sumar los valores de las entradas (inputs) por sus pesos, respectivos, que recibe de otras unidades conectadas a ella; dicha sumatoria ingresa a una función de activación, la misma que permite obtener salidas.

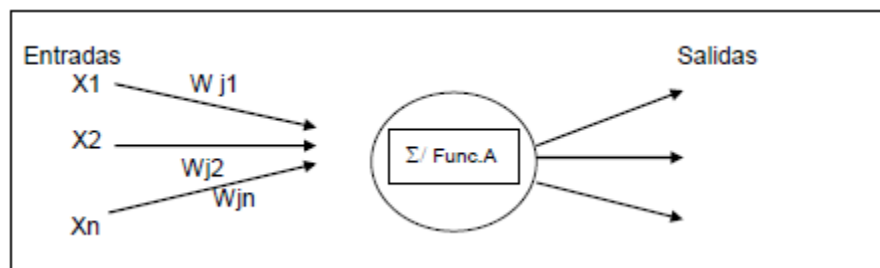


Figura 4. Esquema de Neurona artificial con varios input-outputs (McCulloch-Pitts))

Las ANN son sistemas dinámicos auto adaptativos, tienen la capacidad de auto ajustarse por medio de sus neuronas, gracias a su dinámica tienen la característica de ser

cambiantes e irse adaptando a nuevas condiciones lo que permite que este en proceso de aprendizaje continuo. Para dicho fin no es necesario un algoritmo o modelo matemático específico ya que la ANN va generando su propia distribución de pesos en los enlaces, el investigador o diseñador tiene como función de obtener o escogerla arquitectura de la red apropiada según el problema a resolver.

Si se denomina  $S$  al conjunto de estados posibles de la neurona,  $S$  podrá ser, por ejemplo,  $S = \{0,1\}$ , siendo 0 el estado inactivo y 1 el activo.  $S$  también podrá tomar un número mayor de valores,  $S = \{0,1, 2, \dots, n\}$  para representar una imagen con  $n+1$  colores, o también un intervalo continuo de valores, por ejemplo  $S = [0,1]$ .

Para calcular el estado de activación de una neurona se calcula la entrada total  $\Sigma_i$ . Este valor es igual a la suma de todas las entradas por sus respectivos pesos. En la Figura 4, se aprecia un conjunto de entradas  $X_1, X_2, \dots, X_n$ ; que pueden ser definidas por un vector  $X$ . Cada entrada se multiplica por un peso asociado  $W_1, W_2, \dots, W_n$  para calcular la respectiva sumatoria  $\Sigma$  que es procesada por la función de activación respectiva y se obtienen las salidas correspondientes.

El conjunto de pesos se representa por un vector  $W$ . La sumatoria que corresponde al cuerpo de la neurona, suma todas las entradas ponderadas por sus respectivos pesos, produciendo una salida  $E$ :

$$E = x_1w_1 + x_2w_2 + \dots + x_nw_n \quad (27)$$

Lo cual se puede definir en forma vectorial como sigue:

$$E = X^T W \quad (28)$$

La señal  $E$  es procesada por la función de activación, que produce la salida de la neurona  $S$ . Hay diversas funciones de activación, como por ejemplo:

Lineal:  $S = K E$  con  $K$  constante.

Umbral:  $S = 1$  si  $E \geq \Theta$ ,  $S = 0$  si  $E < \Theta$  siendo  $\Theta$  el umbral constante

Cualquier función:  $S = F(E)$ ; siendo  $F$  una función cualquiera.



Combinando varias neuronas de este tipo, se pueden construir diversos tipos de redes que calculen cualquier función lógica finita. La forma como se organizan las neuronas que se combinan se conoce como su arquitectura. Se considera que las Arquitecturas de las neuronas tienen capas, y en cada capa puede haber una o varias neuronas. Así se considera que existe una capa de entrada, una de salida y entre ambas pueden presentarse capas ocultas o intermedias. (Cevallos,2008).

El aprendizaje de un ANN consiste básicamente en el ajuste entre las conexiones entre las neuronas, no se conoce específicamente sobre la estructura que debe tener una ANN para un problema en particular, por tal los algoritmos a utilizar dependerán de las características de la aplicación, el conocimiento y la experticia del problema a resolver. El aprendizaje puede ser supervisado (si se conocen ejemplos de entradas y sus respectivas salidas; para determinar los parámetros de la red); no supervisado (si sólo se conocen ejemplos de entradas y no de sus respectivas salidas; para determinar los parámetros de la red); y por refuerzo (variante del aprendizaje supervisado, en la que no se dispone de información del error, sino que se determina si la salida producida para dicho patrón es adecuada o no).

El aprendizaje en este caso incluye la diferencia entre el valor real producido en la capa de salida  $y^p$  para un patrón de entrada  $x^p$  y el que debería haber producido dicho patrón, es decir, su salida esperada  $S^p$ , que está en el conjunto de aprendizaje ( $| S^p - y^p |$ ). A esta regla de aprendizaje se la conoce con el nombre de la regla Delta.

La regla Delta utiliza directamente la salida de la red, sin pasarla por ninguna función umbral. Habitualmente, la medida de error global utilizada es el error cuadrático medio, pero otros errores pueden ser utilizados en el modelo, la ecuación es :

$$E = \sum_{p=1}^m E^p = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^m (S^p - y^p)^2 \quad (29)$$

Se busca minimizar el error, recurriendo a un proceso iterativo en el que se van presentando los patrones uno a uno y modificando los parámetros de la red, pesos de las conexiones, mediante la regla de descenso del gradiente. Se realiza un cambio en cada peso proporcional a la derivada del error, medida en el patrón actual, respecto del peso.

El procedimiento de aprendizaje definido por la regla Delta será:

1. Inicializar los pesos de forma aleatoria
2. Introducir un patrón de entrada
3. Calcular la salida de la red, compararla con la esperada ó deseada y
4. obtener la diferencia:  $(S^p - y^p)$
5. Para todos los pesos, multiplicar dicha diferencia por la entrada correspondiente, y ponderarla por una tasa de aprendizaje  $\gamma$
6. Modificar el peso restando del valor antiguo la cantidad obtenida en 4
7. Si no se ha cumplido el criterio de convergencia, regresar a 2; si se han acabado todos los patrones, empezar de nuevo a introducir patrones.

La clasificación de las redes neuronales artificiales es una simple descripción de las diferentes ANN más comunes y frecuentes en la mayoría de los simuladores software de sistemas de computación neuronal. La mayoría de éstos se pueden clasificar en aplicaciones de Predicción, Clasificación, Asociación, Conceptualización, Filtrado y Optimización. Los tres primeros tipos de aplicaciones requieren un entrenamiento supervisado. (Cevallos, 2004).

*Tabla 1. Clasificación de redes neuronales*

Nombre	Diseñador	Año	Tipo	Características
Adaline y Madaline	BeANNrd Widrow	1960	Predicción	Técnicas de Adaptación para el Reconocimiento de Patrones.
Adaptive Resonance Theory Networks (ART)	Carpenter, Grossberg	1960-86	Conceptualización	Reconocimiento de Patrones y Modelo del Sistema Neuronal. Concepto de Resonancia Adaptativa.
Back-Propagation	Rumelhart y Parker	1985	Clasificación	Características: Solución a las limitaciones de su red predecesora el Perceptrón.
Bi-Directional Associative Memory (BAM) Networks	Bart Kosko	1987	Asociación	Características: Inspirada en la red ART
The Boltzmann Machine	Ackley, Hinton y Sejnowski	1985	Asociación	Similar a la red Hopfield.
Brain-State-in a Box	James Anderson	1970-86	Asociación	Red Asociativa Lineal.
Cascade-Correlation-Networks	Fahhman y Lebiere	1990	Asociación	Adición de nuevas capas ocultas en cascada.
Counter-Propagation	Hecht-Nielsen	1987	Clasificación	Clasificación Adaptativa de Patrones.
Delta-Bar-Delta (DBD) Networks	Jacobb	1988	Clasificación	Métodos Heurísticos para Acelerar la Convergencia.
Digital Neural Network Architecture (DNNA) Networks	Neural Semiconductor Inc.	1990	Predicción	Implementación Hardware de la función Sigmoid.
Directed Random Search (DRS) Networks	Maytas y Solis	1965-81	Clasificación	Técnica de valores Random en el mecanismo de Ajuste de Pesos.
Functional-link Networks (FLN)	Pao	1989	Clasificación	Versión mejorada de la red Backpropagation.
Hamming Networks	Lippman	1987	Asociación	Clasificador de vectores binarios utilizando la Distancia Hamming.
Hopfield Networks	Hopfield	1982	Optimización	Concepto de la red en términos de energía.

### **Perceptrón Multicapa:**

El aprendizaje de esta red se efectúa siguiendo el algoritmo de la Regla Delta Generalizada, y consta de dos fases. En la primera se presentan pares entradas – salidas. Los valores de las entradas se propagan hacia adelante y al llegar a las salidas, se evalúa el error cometido.

En la segunda fase se vuelve hacia atrás corrigiendo los pesos de los nodos, con el fin de que el error se vaya haciendo más pequeño. Esta segunda fase es la que da nombre al algoritmo: backpropagation.

Con el objetivo de mejorar el desempeño de la red PMC se han desarrollado diversos algoritmos de aprendizaje, entre los más conocidos se tienen (Cevallos, 2004):

*Tabla 2. Algoritmos de aprendizaje para Perceptrón Multicapa*

Nombre	Característica
Gradiente con Momentum traingd	Al gradiente se agrega el momentum, con valor entre 0 y 1
Gradiente con tasa de cambio variable	Adaptativo traingda, Combinado adaptativo con momentum traingdx
Gradiente Conjugado	Ajustando la variación de la dirección del gradiente mediante funciones especiales: Fletcher Reever traingcf; Polak Riviere trancgp; Powell Beale Restarts (traingcb); Con escala trainscg
Quasi Newton	BFGS Utiliza el método de newton en lugar del gradiente conjugado trainbfg; ; Secante: Utiliza combinación de algoritmo de cuasi Newton y gradiente conjugado trainoss.
Levenberg Marquardt	En lugar del gradiente conjugado utiliza el método de Newton, pero no usa la Matriz Hessiana sino una aproximación

#### 5.4 El Error Porcentual Global (GPE)

Para comparar la adecuación de los modelos, Souza et.al 2015, calcularon el error porcentual global (GPE) para los resultados de cada método, utilizando la ecuación :

$$GPE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left| \frac{y_i^*}{\theta_i} - 1 \right| \quad (30)$$

donde:  $y_i^*$  son valores de las respuestas óptimas,  $\theta_i$ , objetivos definidos,  $m$ , número de objetivos.

El GPE, como su nombre lo declara, es un índice de error, el cual nos define la eficiencia de cada técnica de optimización multi-respuesta. En este caso, se evalúa la distancia entre la respuesta óptima obtenido con cada técnicas de optimización multi-respuesta con el valor óptimo ideal individual. Esta distancia se divide sobre el valor óptimo individual para eliminar unidades de medida y poder expresar en porcentaje. Con las diferentes técnicas de optimización multi-respuesta esperamos que dicha distancia sea lo más pequeña posible para cada respuesta y que el GPE tome valores en el intervalo [0, 1]; cero, en el caso de que optimo multi-respuesta coincide con cada optimo individual, y uno, en el caso extremo en que todo los valores de los óptimos multi-respuestas se alejen en valor absoluto más del valor del óptimo individual. Se espera que esto no suceda debido a que para establecer el diseño central compuesto se ha determinado curvatura y se ha ensayado en laboratorio en una región experimental delimitada por los puntos axiales.

#### 5.5 El método de las direcciones factibles

En un método de programación No Lineal para resolver problemas restringidos. En este método se determina una dirección de mejoramiento  $\mathbf{d}$  con respecto a un valor inicial  $\mathbf{x}_0$ . Para asegurar que el incremento de  $\mathbf{x}_0$  no salga de la región factible se busca un escalar  $\lambda$  de tal manera que  $\mathbf{x}_0 + \lambda \mathbf{d}$  pertenezca a la región factible, encontrado dicho valor el proceso se vuelve iterativo hasta lograr una tolerancia determinada (Peñuela C. 2016)

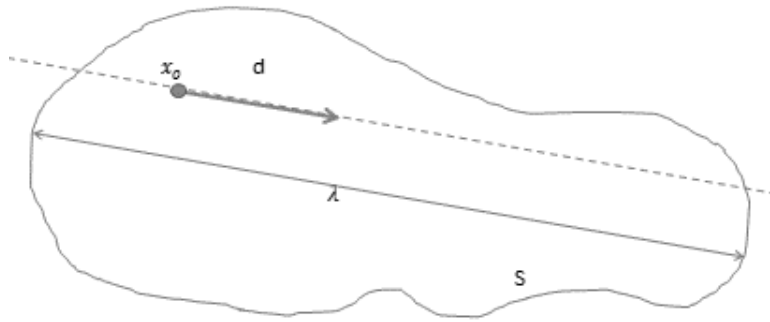


Figura 5. Método de Direcciones Factibles. Fuente: Realización propia.

El método de las direcciones factibles se puede programar en MATLAB, o simplemente se usa el comando *fmincon*, con el cual se encuentra el mínimo de una función multivariable no lineal restringida, los modelos de programación no lineal que resuelve este comando es el siguiente:

*minimizar*  $f(x)$

*sujeto a:*

$$c(x) \leq 0$$

$$ceq(x) = 0$$

$$A * x \leq b$$

$$Aeq * x = beq$$

$$lb \leq x \leq ub$$

La sintaxis para el comando *fmincon* es:

$$x = fmincon(fun, x_0, A, b, Aeq, beq, lb, ub, nonlcon)$$

*b* y *beq* son vectores, *A* y *Aeq* son matrices, *x*, *lb* y *ub* pueden ser vectores o matrices *c(x)* y *ceq(x)* son funciones que devuelven vectores y *f(x)* es la función objetivo a minimizar y retorna un escalar, estas tres últimas funciones pueden ser lineales o no lineales, *x<sub>0</sub>* es el punto inicial del método. La función *nonlcon* calcula las restricciones  $c(x) \leq 0$  no lineales de desigualdad y las restricciones de igualdad no lineales  $ceq(x) = 0$ .

## **6. Análisis Estadístico de Datos**

El objetivo de este capítulo es realizar un análisis de los datos poder llevar a cabo la optimización multi-respuesta, previa recolección de datos, inicialmente se presentan los datos, para esto se hace la aplicación de cada técnica a diseños centrales compuestos rotables  $2^K$  obtenidos en laboratorios en la investigación de la universidad de Nariño, a cada respuesta se analizara la relación que esta tenga con las otras y con los factores, para posteriormente encontrar los óptimos individuales y así obtener los valores deseados, los cuales serán comparados con las respuestas obtenidas de las técnicas de optimización multi-respuesta. Para tablas y gráficos de este capítulo se utilizaron los paquetes statgraphics y Excel

### **6.1 Recopilación de datos**

Para poder hacer una comparación de las técnicas de optimización multi-respuesta es necesario contar con el conjunto de datos recolectado e identificar las características de los mismos. A continuación, se da una breve descripción de dichos datos, así como el análisis estadístico correspondiente, a partir del cual se pretende abordar situaciones que pueden afectar el funcionamiento adecuado de los métodos.

Para la aplicación de las técnicas de optimización multi-respuesta, se evaluaron los tratamientos para mejorar la calidad agua en el Departamento de Nariño. Para ello, se utilizaron tres objetivos para cubrir diferentes aspectos al tratamiento tales como Mineralización de contaminante ( $Y_1$ ), Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ ) y la eliminación de contaminante ( $Y_3$ ) mientras la dosis de peróxido de hidrógeno ( $X_1$ ) y la concentración del catalizador ( $X_2$ ) son los factores sobre las variables respuesta con criterio de optimización de maximización para las tres respuestas. La configuración de diseño en las variables originales y los datos de respuesta múltiple se muestran a continuación:

Tabla 3. Diseño experimental mejoramiento calidad de agua.

Número de ensayo	Factores		Respuestas		
	Dosis de peróxido de hidrógeno (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> )	Concentración del catalizador	Mineralización de contaminante: Y <sub>1</sub>	Peróxido de hidrógeno que reaccionó: Y <sub>2</sub>	Eliminación de contaminante: Y <sub>3</sub>
	mg H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> / mg COT	(g/L)	% de COT/gCat	% H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> que reaccionó/gCat	% decolorización/gCat
1	0,3897283	5,6	8,5104494	21,837816	9,867707636
2	0,5174605	5,6	4,8764083	24,288844	7,909962016
3	0,3897283	8,4	5,6233774	22,117056	7,093950495
4	0,5174605	8,4	5,0498118	15,67293	5,952254405
5	0,3632741	7	0,0650978	21,591091	5,609937589
6	0,5439147	7	4,7364539	19,125187	7,420953575
7	0,4535944	5,020101	8,1118253	23,092465	7,650059921
8	0,4535944	8,979899	1,3188693	10,837528	7,230497931
9	0,4535944	7	9,6393956	16,471983	10,78107805
10	0,4535944	7	8,2798088	18,943259	10,60988811

Fuente: proyecto de investigación mejoramiento de calidad de agua UDENAR

Obtenido el DCC se procede a codificar las variables independientes usando la ecuación (Montgomery, et al 2004)

$$x_{codificado} = \frac{X_{sin\ codificar} - \left(\frac{Vmax_i + Vmin_i}{2}\right)}{\left(\frac{Vmax_i - Vmin_i}{2}\right)} \quad (31)$$

Para volver a las variables originales se aplica la ecuación (32)

$$X_{sin\ codificar} = \left(\frac{Vmax_i + Vmin_i}{2}\right) + \left(\frac{Vmax_i - Vmin_i}{2}\right) * x_{codificado} \quad (32)$$

Para calcular los axiales en un DCC  $2^k$  rotatable se aplica (33)



$$axiales = \left( \frac{V_{max_i} + V_{min_i}}{2} \right) + \left( \frac{V_{max_i} - V_{min_i}}{2} \right) * \sqrt[4]{2^k} \quad (33)$$

La matriz diseño con variables codificadas, junto con los términos cuadráticos y las interacciones se muestran en la tabla 4.

*Tabla 4. Diseño experimental mejoramiento calidad de agua (codificado)*

No	$x_1$	$x_2$	$x_1^2$	$x_2^2$	$x_1x_2$
1	-1	-1	1	1	1
2	1	-1	1	1	-1
3	-1	1	1	1	-1
4	1	1	1	1	1
5	-1,414214	0	2	0	0
6	1,4142136	0	2	0	0
7	0	-1,414214	0	2	0
8	0	1,4142136	0	2	0
9	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0

## 6.2 Resumen Estadístico

La tabla 5 muestra el resumen estadístico para cada una de las variables seleccionadas. Se observan los valores máximos y mínimos de cada variable respuesta junto con su valor promedio, desviación estándar y coeficiente de variación. Los valores de sesgo y curtosis estandarizados indican que se encuentran dentro del intervalo -2 a 2 y por tanto no indican desviaciones significativas de la normalidad de estas variables

*Tabla 5. Resumen estadístico variables respuesta*

	Mineralización de contaminante: Y1	Peróxido de hidrógeno que reacciona: Y2	Eliminación de contaminante: Y3
Recuento	10	10	10
Promedio	5,62115	19,3978	8,01263
Desviación Estándar	3,14129	4,1059	1,82017
Coefficiente de Variación	55,8834%	21,1668%	22,7163%
Mínimo	0,0650978	10,8375	5,60994
Máximo	9,6394	24,2888	10,7811
Rango	9,5743	13,4513	5,17114
Sesgo Estandarizado	-0,747337	-1,2732	0,624292
Curtosis Estandarizada	-0,319052	0,424778	-0,63614

*Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics*

### **Matriz de correlaciones de las variables respuestas**

La tabla 6 es la matriz de correlación de las variables respuestas. El valor debajo del coeficiente de correlación de Pearson es su P-valor. Se observa que las respuestas “Eliminación de contaminante y Mineralización de contaminantes” están altamente correlacionadas.

*Tabla 6. Tabla de correlación para las variables respuesta*

	Eliminación de contaminante: Y1	Mineralización de contaminante: Y2	Peróxido de hidrógeno que reaccionado: Y3
Eliminación de contaminante: Valor-p		0,7963 0,0058	0,0025 0,9945
Mineralización de contaminante: Valor-p	0,7963 0,0058		0,2296 0,5235
Peróxido de hidrógeno que reaccionado: Valor-p	0,0025 0,9945	0,2296 0,5235	

*Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics*

Las correlaciones entre variables independientes se observan en la siguiente gráfica.

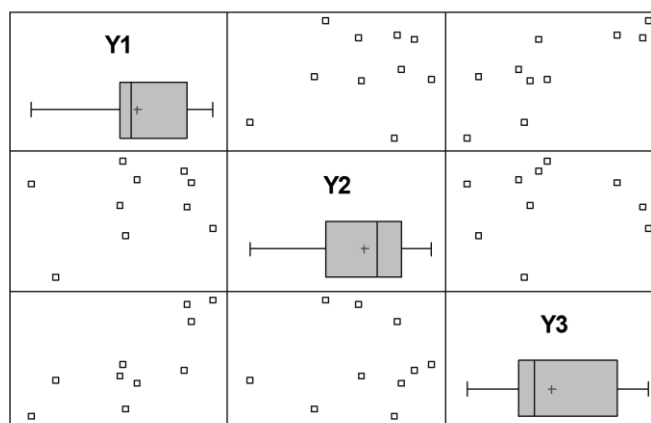


Figura 6. Matriz de correlación y gráficas de dispersión. Fuente: Realización propia paquete estadística statgraphics

### 6.3 Estimación de parámetros individuales

A continuación, se presenta el análisis específico para cada respuesta y la obtención de los óptimos individuales para las mismas:

En la tabla 7 se muestran los coeficientes y  $R^2$  de las estimaciones de las respuestas con variables independientes codificadas.

Tabla 7. Estimación de parámetros individuales respuestas

	Coeficientes Y1	Coeficientes Y2	Coeficientes Y3
Intercepción	8,959602193	17,70762103	10,6954831
x1	0,29983605	-0,935051678	-0,06728479
x2	-1,540044859	-3,208471647	-0,66560188
x1^2	-2,665175633	1,904657408	-1,90799215
x2^2	-1,507889927	0,208086192	-1,44557548
x1*x2	0,765118864	-2,22378847	0,20401238
$R^2$	62,22%	84,22%	75,78%

Fuente: Realización propia paquete estadística Excel

A continuación se indican las funciones estimadas para cada una de las variables respuestas, tanto con valores codificados y sin codificar

- Funciones de estimaciones de las respuestas con variables independientes codificadas.

$$\hat{y}_1(x) = 8,9596 + 0,2998x_1 - 1,5400x_2 - 2,6652x_1^2 - 1,5079x_2^2 + 0,76512x_1x_2$$

$$\hat{y}_2(x) = 17,7076 - 0,9351x_1 - 3,2085x_2 + 1,9047x_1^2 + 0,2081x_2^2 - 2,2238x_1x_2$$

$$\hat{y}_3(x) = 10,6955 - 0,06728x_1 - 0,6656x_2 - 1,90799x_1^2 - 1,4456x_2^2 + 0,2040x_1x_2$$

- Funciones de estimaciones de las respuestas con variables independientes SIN codificar,

$$\hat{y}_1(x) = Y_{Min. \text{ conta}} = -130,438 + 537,579X_1 + 5,7891X_2 - 653,43X_1^2 - 0,769335X_2^2 + 8,55732X_1X_2$$

$$\hat{y}_2(x) = Y_{Peroxido} = 62,7001 - 264,17X_1 + 7,50351X_2 + 466,969X_1^2 + 0,106166X_2^2 - 24,8715X_1X_2$$

$$\hat{y}_3(x) = Y_{Elim. \text{ de cont}} = -110,64 + 407,347X_1 + 8,81514X_2 - 467,788X_1^2 - 0,73754X_2^2 + 2,28174X_1X_2$$

En la tabla 8 se muestran las estimaciones de cada respuesta obtenidos con las funciones de estimación,

Tabla 8. Estimación de respuestas

Observación	$\hat{y}_1(x)$	$\hat{y}_2(x)$	$\hat{y}_3(x)$
1	6,791864307	21,74009948	8,2788145
2	5,861298677	24,31757307	7,73622015
3	2,181536861	19,77073313	6,53958598
4	4,311446688	13,45305283	6,81304116
5	3,20521872	22,83929861	6,97465384
6	4,053283136	20,19457308	6,78434371
7	8,121774664	22,66125753	8,74563532
8	3,765870012	13,5863293	6,86302892
9	8,959602193	17,70762103	10,6954831
10	8,959602193	17,70762103	10,6954831

Fuente: Realización propia paquete estadística Excel

### Optimización de las respuestas para calcular los óptimos individuales

Mediante procesos mono-objetivos tales como, superficie de respuestas, direcciones factibles se optimiza cada respuesta estimada, obteniendo lo óptimos individuales.

$$opt_j = (x_{1j}^*, x_{2j}^*) \quad , \quad j = 1, 2, 3,$$

	$x_{1j}^*$	$x_{2j}^*$	$\theta_j$
$\hat{y}_1(x)$	-0,01769 {0,45246}	-0,5151 {6,278815}	9,3536
$\hat{y}_2(x)$	0,7142 {0,4992078}	-0,9509 {5,668802}	22,7609
$\hat{y}_3(x)$	-0.03005 {0,451675}	-0,2323 {6,674729}	10,7733

*Fuente: Realización propia paquete Excel*

Nota: valores entre llaves son los valores óptimos individuales sin codificar

Remplazando cada optimo individual en cada función de respuesta estimada, obtenemos un vector de metas, que lo llamaremos  $\theta$

$$\theta = \begin{pmatrix} \hat{y}_1(opt_1) \\ \hat{y}_2(opt_2) \\ \hat{y}_3(opt_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \theta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9,3536 \\ 22,7609 \\ 10,7733 \end{pmatrix}$$

## **7. Resultados y Discusión**

En el presente capítulo se mostrarán los resultados obtenidos para el conjunto de datos definidos en el capítulo anterior cuyas características de interés serán optimizadas conjuntamente haciendo uso de las técnicas de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad (DF), Función de Distancia Generalizada (GDF), Análisis Envolvente de Datos (DEA), Análisis de Componentes Principales (PCA) y Redes Neuronales Artificiales (ANN). Para poder realizar una comparación entre los distintos métodos de optimización multi-respuesta es necesario establecer un criterio para tal fin, el cual, estará dado por un índice que cuantifique, de alguna manera, la diferencia entre los valores más deseables para cada una de las variables de respuesta individuales con los valores resultantes de la función multi-respuesta para dichas variables de la aplicación de los procedimientos aplicados, este criterio se denomina Error Porcentual Global (GPE). Para el análisis de cada una de las técnicas y optimización de las mismas como para el cálculo del GPE se utilizó el software MATLAB.

### **7.1 Aplicación de las Técnicas de Optimización Multi-respuestas**

Después de realizar la estimación de los modelos de regresión para cada una de las variables de todos los conjuntos de datos presentados en el capítulo 5 el siguiente paso fue proceder con la optimización multi-respuesta. Para tal fin, fue necesario obtener una herramienta de tal modo que fuera posible implementar cada uno de los procedimientos de optimización. Cada uno de los planteamientos de optimización que se consideraron para la realización de este proyecto, así como los pasos necesarios para su implementación, son presentados a continuación.<sup>1</sup>

#### **7.1.1 Función de Deseabilidad (DF)**

1. Se transforman las estimaciones de las repuestas
  - Se determinan los mínimos ( $L_i$ ) , máximos ( $U_i$ ) y objetivos ( $T_i$ ) deseables para cada respuesta. (sug. Se puede obtener los mínimos y máximos de las respuestas observadas o valores asignados por el experto)

- Se transforman las estimaciones de las respuestas a valores entre 0 y 1, dependiendo si es minimizar, maximizar o alcanzar un objetivo. Como el criterio de optimización es de maximizar las tres variables respuestas y se aplica la ecuación (4) y obtuvimos:

d1	d2	d3
0,70258589	0,81052078	0,51610992
0,60539175	1	0,41118252
0,22105423	0,66411382	0,17977628
0,44351544	0,19444378	0,2326573
0,32797402	0,89223763	0,26391011
0,41655121	0,695623	0,22710776
0,84149011	0,87900167	0,60638417
0,38653197	0,20435184	0,24232398
0,9289981	0,5107376	0,98344756
0,9289981	0,5107376	0,98344756

- Una vez que las  $m$  variables respuestas se transforman en funciones de deseabilidad, se combinan en una función única denominada Deseabilidad Global ( $D$ ) para encontrar las mejores respuestas conjuntas usando la ecuación (8) y considerando  $r_i = 1$ , para todo  $i$ .

$d1$	$d2$	$d3$	$D$
0,70258589	0,81052078	0,51610992	<b>0,66486774</b>
0,60539175	1	0,41118252	<b>0,62905755</b>
0,22105423	0,66411382	0,17977628	<b>0,29773136</b>
0,44351544	0,19444378	0,2326573	<b>0,2717314</b>

0,32797402	0,89223763	0,26391011	<b>0,42585198</b>
0,41655121	0,695623	0,22710776	<b>0,40373038</b>
0,84149011	0,87900167	0,60638417	<b>0,7654712</b>
0,38653197	0,20435184	0,24232398	<b>0,26749774</b>
0,9289981	0,5107376	0,98344756	<b>0,77563004</b>
0,9289981	0,5107376	0,98344756	<b>0,77563004</b>

3. Por métodos de mínimos cuadrados ordinarios se encuentra un modelo cuadrático para D, usando la matriz diseño  $X_{cic}$ , obteniendo la función de deseabilidad (DF)

$$\text{función } DF = 0.77563004 - 0.011636851x_1 - 0.17858792x_2 \\ - 0.18036713x_1^2 - 0.12952049x_2^2 + 0.0024525578x_1x_2$$

- Mediante procesos mono-objetivos tales como, superficie de respuestas, direcciones factibles se optimiza la función DF, obteniendo el óptimo multi-respuesta codificado

$$OPT\_MR = (x_1^*, x_2^*)$$

$$OPT\_MR = (-0.036950220534468 \quad -0.689766663603096)$$

El óptimo sin codificar es:

$$OPT\_MR = (0.451234561866 \quad 6.03432667096)$$

La función de DESEABILIDAD toma el valor de 0.837437261535499

Se reemplaza el  $OPT\_MR$  en cada función respuesta estimada obteniendo el vector:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1(OPT\_MR) \\ \hat{y}_2(OPT\_MR) \\ \hat{y}_3(OPT\_MR) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.30923565274659 \\ 20.000193722503199 \\ 10.47190082170317 \end{pmatrix}$$

Para comparar la adecuación de los modelos se calcula el error porcentual global (GPE).



$$\text{GPE\_DESEABILIDAD} = 0.05133798123535357$$

En la tabla 9 se indican los óptimos multi-respuesta obtenidos mediante la técnica de optimización multi-respuesta, Función de Deseabilidad (DF).

Tabla 9. Óptimos multirespuesta, método función de deseabilidad

Maximizar	Peróxido de hidrogeno ( $X_1$ )	Concentración del catalizador ( $X_2$ )	Respuesta
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0.45123	6.03432	9.3092
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			20.00019
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			10.4719

### 7.1.2 Función de Distancias Generalizada (GDF)

1. Calculamos la estimación de la matriz  $\hat{\Sigma}$ , aplicando (10) y se obtuvo

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 8,38855616 & 4,53549932 & 1,94508877 \\ 4,53549932 & 5,9851297 & -0,28280839 \\ 1,94508877 & -0,28280839 & 1,805184 \end{pmatrix}$$

Con  $n = 10$  y  $p = 6$

Al mismo tiempo calculamos  $\hat{\Sigma}^{-1}$

$$\hat{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} 0,42567776 & -0,34681664 & -0,51300238 \\ -0,34681664 & 0,45089217 & 0,44433434 \\ -0,51300238 & 0,44433434 & 1,17633252 \end{pmatrix}$$

2. Calculamos: **numerador** =  $(\hat{y}(x) - \theta)^t \hat{\Sigma}^{-1} (\hat{y}(x) - \theta)$

No	<i>numerador</i>
1	4,47568189
2	5,82197825
3	12,2334064
4	48,051427
5	9,17567384
6	11,6155952
7	3,01853342
8	43,1340234
9	10,5238092
10	10,5238092

3. Calculamos ***denominador*** =  $\mathbf{z}^t(\mathbf{x})(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{z}(\mathbf{x}) = \mathbf{X}_{cic}^t * (\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1} * \mathbf{X}_{cic}$

No	<b><i>denominador</i></b>
1	0,625
2	0,625
3	0,625
4	0,625
5	0,625
6	0,625
7	0,625
8	0,625
9	0,500
10	0,500

4. Calculamos las distancias generalizadas para cada tratamiento, que son en el fondo distancia de Mahalanobis, aplicando (15)

No	$\hat{\rho}[\hat{y}(x), \theta]$
1	2,676
2	3,052
3	4,424
4	8,768
5	3,832
6	4,311
7	2,198
8	8,307
9	4,588
10	4,588

5. Por métodos de mínimos cuadrados ordinarios se encuentra un modelo cuadrático para  $\hat{\rho}[\hat{y}(x), \theta]$ , usando las matrices diseño  $X_{cic}$ , obteniendo la Función de Distancia Generalizada (GDF)

$$\text{función GDF} = 4.5878389 + 0.67477708x_1 + 2.0131309x_2 - 0.2412186x_1^2 + 0.34943679x_2^2 + 0.99202973x_1x_2$$

- Mediante procesos mono-objetivos tales como, superficie de respuestas, direcciones factibles se optimiza la función GDF , obteniendo el óptimo multi-respuesta. codificad

$$OPT_{MR} = (x_1^*, x_2^*)$$

$$OPT_{MR} = (0.423772982036525 \quad -1.111138823766131)$$

El óptimo sin codificar es:

$$OPT\_MR = (0.480659155241064 \quad 5.444405646727416)$$

La Función de Distancia Generalizada toma el valor de 2.5579117, se espera que este valor sea lo más pequeño posible.

6. Se reemplaza el  $OPT\_MR$  en cada función respuesta estimada obteniendo el vector:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1(OPT\_MR) \\ \hat{y}_2(OPT\_MR) \\ \hat{y}_3(OPT\_MR) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.0972892134645 \\ 22.52249991339661 \\ 9.18308815455939 \end{pmatrix}$$

7. Para comparar la adecuación de los modelos se calcula el error porcentual global (GPE)

$$GPE\_GDF = 0.09746546017603$$

En la tabla 10 se indican los óptimos multi-respuesta obtenidos mediante la técnica de optimización multi-respuesta, Función de Distancia Generalizada (GDF).

Tabla 10. Óptimos multi-respuesta, función de distancia generalizada

Maximizar	Peróxido de hidrogeno ( $X_1$ )	Concentración del catalizador ( $X_2$ )	Respuesta
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0.480659	5.4444056	8.097289
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			22.52250
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			9.183088

### 7.1.3 Análisis Envoltente de Datos (DEA)

1. Se realiza transformaciones de las matrices iniciales

- Se estandariza la matriz de las  $X$  con media y desviación estándar y se complementa con términos cuadráticos e interacciones.

- Se estandariza la matriz de las  $Y$  con máximos y mínimos para ingresar a DEAsolver o en Matlab.
- 2. Se calcula la medida de eficiencia general utilizada por DEA.
- Se formula un modelo de programación no lineal (17) para el cálculo de las eficiencias para cada tratamiento, los cuales se consideran como Unidades de Toma de Decisión (DMU).

El modelo de programación no lineal (17) puede formularse como un modelo programación lineal (18) estableciendo su denominador igual a 1 y maximizando su numerador.

Las eficiencias se calculan directamente usando una macro de Excel llamado DEAsolver, el cual aplica los modelos (17) o (18). El resultado fue el siguiente

No.	EFICIENCIAS
1	1
2	1
3	0,87554007
4	0,557824665
5	0,799443179
6	0,670045929
7	1
8	0,313385481
9	1
10	1

3. Se calculan las *SUPEREFICIENCIA* eliminando del modelo de programación lineal (19) la restricción para la  $DMU_k$

Se realizó el algoritmo en MATLAB y se calcularon las Supereficiencias, las cuales se indican en la siguiente tabla.

No.	SUPEREFICIENCIAS
1	1,10490335
2	1,10018514
3	0,87554007
4	0,557824665
5	0,799443179
6	0,670045929
7	1,059038719
8	0,313385481
9	1,144620687
10	1,040699069

4. Por métodos de mínimos cuadrados ordinarios se encuentra un modelo cuadrático para *SUPEREFICIENCIA* usando la matriz *XestConMedDestCI*, obtenemos la *Función de Supereficiencia*.

*función SUPEREFICIENCIA*

$$= 1.0926599 - 0.059565374x_1 - 0.21522406x_2 \\ - 0.11482126x_1^2 - 0.13639124x_2^2 - 0.069554932x_1x_2$$

Mediante las direcciones factibles se optimiza la función DEA , obteniendo el óptimo multi-respuesta.

$$OPT_{MR} = (x_1^*, x_2^* ) \\ OPT_{MR} = (-0.022118370236698 \quad -0.783352041663273)$$

El óptimo sin codificar es:

$$OPT\_MR = (0.45218181555 \quad 5.903307141671417)$$

*Nota.* La Función de Supereficiencia toma el valor de 1.177617103255.

5. Se reemplaza el  $OPT\_MR$  en cada función respuesta estimada obteniendo el vector:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1(OPT\_MR) \\ \hat{y}_2(OPT\_MR) \\ \hat{y}_3(OPT\_MR) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.2460183287289 \\ 20.331757159215 \\ 10.333909733709 \end{pmatrix}$$

6. Para comparar la adecuación de los modelos se calcula el error porcentual global (GPE) . Valor del GPE "Error Porcentual Global" para las supereficiencias es:

$$GPE\_SUPEREFIENCIAS = 0.0530046311558$$

En la tabla 11 se indican los óptimos multi-respuesta obtenidos mediante la técnica de optimización multi-respuesta, Análisis Envolvente de Datos (DEA) para las supereficiencias.

*Tabla 11. Óptimos multi-respuesta, método Análisis envolvente de datos supereficiencias*

<i>Maximizar</i>	<i>Peróxido de hidrogeno (<math>X_1</math>)</i>	<i>Concentración del catalizador (<math>X_2</math>)</i>	<i>Respuesta</i>
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0.45218	5.903307	9.24602
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			20.3176
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			10.33391

A continuación se presentan los resultados de optimización usando la técnica de multi-respuesta, Análisis Envolvente de Datos (DEA) para las *eficiencias*.

1. Por métodos de mínimos cuadrados ordinarios se encuentra un modelo cuadrático para las *EFICIENCIAS* usando la matriz *XestConMedDestCI*, obteniendo la función de eficiencia

*función EFICIENCIAS*

$$= 1.0 - 0.059009328x_1 - 0.18121436x_2 - 0.081752968x_1^2 - 0.11644266x_2^2 - 0.070603423x_1x_2$$

Mediante el método de las direcciones factibles se optimiza la función *EFICIENCIAS*, obteniendo el óptimo multi-respuesta.

$$OPT\_MR = (x_1^*, x_2^*)$$

$$OPT\_MR = (-0.028648199999666 \quad -0.769436908399391)$$

El óptimo sin codificar es:

$$OPT\_MR = (0.4517647808229 \quad 5.922788328240852)$$

*Nota.* La función de eficiencia toma el valor de 1.070562206195532.

2. Se reemplaza el *OPT\_MR* en cada función respuesta estimada obteniendo el vector:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1(OPT\_MR) \\ \hat{y}_2(OPT\_MR) \\ \hat{y}_3(OPT\_MR) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.2579370928110 \\ 20.278863266829 \\ 10.356651818936 \end{pmatrix}$$

Para comparar la adecuación de los modelos se calcula el error porcentual global (GPE).

$$GPE\_EFICIENCIAS = 0.0526508606483$$

Esta tabla 12 muestra la combinación de niveles de factores que maximizan las respuestas mediante la técnica de análisis envolvente de datos para las eficiencias. También muestra la combinación de factores a la cual se alcanza el óptimo.



Tabla 12. Óptimos multirespuesta, método análisis envoltante de datos para las eficiencias

Maximizar	Peróxido de hidrogeno ( $X_1$ )	Concentración del catalizador ( $X_2$ )	Respuesta
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0,45176	5,922788	9.2579
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			20.27886
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			10.35665

#### 7.1.4 Análisis de Componentes Principales (PCA)

La metodología para aplicar PCA en la optimización multi-respuesta fue la siguiente:

1. Estandarizamos con media y desviación estándar la matriz de las variables independientes (factores) y la completamos con los términos cuadráticos y las interacciones. Llamaremos a esta matriz  **$X_{PCAscore}$**
2. Determinamos las variables respuesta que se maximizan (salidas) y las que se minimizan (entradas) y calculamos los cocientes entre cada salida sobre cada entrada (salidas/entradas). Obtenemos una matriz que la llamaremos  **$Y_{cociente}$**
3. Obtenemos una matriz  **$Y1$** , estandarizando la matriz  **$Y_{cociente}$**  con máximos y mínimos.
  - Obtenemos la matriz  **$EstandarizadaY1$** , estandarizando  **$Y1$**  con media y desviación estándar.
  - A esta última matriz le calculamos la matriz de correlación.

$$MATRIZcorrelacion = S = \frac{EstandarizadaY1^t * EstandarizadaY1}{n - 1}$$

1	0,22969003	0,79627809
0,22969003	1	0,00248917
0,79627809	0,00248917	1

4. Calculamos los valores propios y vectores propios de la matriz de correlación  $S$ . Para las tres variables respuesta tendremos tres valores propios:  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  y tres vectores propios asociados a cada valor propio, así:

$$|S - \lambda I| = 0$$

$$(S - \lambda I)v = 0$$

Llamemos a la matriz formada por los vectores propios  $V$

5. Como la matriz  $S$  es definida positiva, sus valores propios son todos positivos. En este paso le asignamos un signo positivo o negativo a cada valor propio dependiendo del porcentaje del total de términos negativos con relación a la suma total de los valores absolutos de los términos del vector propio respectivo. Si supera el 50% porciento le asignamos signo “menos”

Para el primer valor propio le correspondería el signo (+), debido a que el porcentaje de negativos es cero. Para el segundo valor propio le correspondería el signo (–), debido a que el porcentaje de negativos es del 77,4%

6. Determinamos los componentes principales para las matriz *EstandarizadaY1*, aplicando

$$EstandarizadaY1 * V$$

7. Calculamos la varianza explicada por cada componente

La proporción de la variabilidad total explicada por el componente  $j$  viene dada por (24)

8. Seleccionamos los componentes principales que expliquen por lo menos el 90% de la variabilidad total. (Existen otros métodos para seleccionar el número de componentes, para este caso se seleccionan los dos primeros componentes)
9. Se obtiene una sola medida ponderando los componentes principales seleccionados en términos de la información sobre los valores propios con su signo asignado

anteriormente, llamado Índice Global Multivariante (MGI). Con la ecuación (21) se obtuvo

$$MGI = 1,8394096 * PC1 - 0,99867429 * PC2$$

No	PC1	PC2	MGI
1	1,45986095	-0,286182717	2,95648698
2	0,02971577	-1,160787234	1,21361069
3	-0,2113104	-0,776211973	0,38860967
4	-1,07679336	0,557475734	-2,52663281
5	-2,04106007	-0,883593037	-2,85151326
6	-0,43297614	-0,027009701	-0,76511681
7	0,60310743	-0,917777781	2,01989161
8	-1,67224726	1,880623675	-4,93735574
9	1,79623049	1,109467149	2,17804501
10	1,54547259	0,503995886	2,32397467

- Se obtiene una función PCAscore con la matriz del ***X\_PCAscore*** como variables independientes y como variable respuesta **MGI**.

*función PCAscore*

$$= 2.2510098 - 0.20123182x_1 - 1.9029604x_2 - 1.3282461x_1^2 - 1.1728759x_2^2 - 0.26052582x_1x_2$$

- Mediante procesos mono-objetivos tales como, superficie de respuestas, direcciones factibles se optimiza la función PCAscore, obteniendo el óptimo multi-respuesta.

$$OPT\_MR = (x_1^*, x_2^*)$$

$$OPT\_MR = (0.003850076187702 \quad -0.811664462094679)$$

El óptimo sin codificar es

$$OPT\_MR = (0.45384032 \quad 5.863669753)$$

10. Se reemplaza el  $OPT\_MR$  en cada función respuesta estimada obteniendo el vector:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1(OPT\_MR) \\ \hat{y}_2(OPT\_MR) \\ \hat{y}_3(OPT\_MR) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.21492911070 \\ 20.452287945789 \\ 10.2824596332 \end{pmatrix}$$

11. Para comparar la adecuación de los modelos se calcula el error porcentual global para la función PCAscore.

$$GPE\_PCAscore = 0.05393927$$

La tabla 13 muestra la combinación de niveles de factores que maximizan las respuestas mediante la técnica de Análisis de Componentes Principales. También muestra la combinación de factores a la cual se alcanza el óptimo.

Tabla 13. Óptimos multi-respuesta, método análisis de componentes principales

Maximizar	Peróxido de hidrogeno ( $X_1$ )	Concentración del catalizador ( $X_2$ )	Respuesta
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0,4538	5,86366	9.214929
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			20.45229
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			10.28246

### **7.1.5 Redes Neuronales Artificiales (ANN)**

Para este caso de aplicación de redes neuronales se trabajó con la metodología sugerida por Lee-Ing Tong y kun-Lin Hsieh, en su artículo “A Novel mean of Applying Neural Networks to Optimize the Multireponse Problem”, publicado en el Quality Engineering, Vol.13 (2000).

El criterio que para escoger esta red es la que el menor error cuadrático medio se obtuvo entre las redes perceptrón multicapa (MLP) o redes de base radial (RBF) para modelar la relación entre las respuestas y sus correspondientes factores significativos. Los mejores resultados fueron obtenidos con la red percepción multicapa con el algoritmo de retro propagación de Levenberg-Marquardt, Las funciones de activación de las capas de neuronas ocultas en todas las redes son tangente sigmoidea tansig. El entrenamiento termina cuando se obtiene en el mínimo error cuadrático medio de entrenamiento, para lo cual se realizan m ciclos de aprendizaje (Epocas).

Para evaluar el comportamiento de ANN en la optimización multirespuesta se utilizaron los mismos datos experimentales que para el enfoque clásico Los datos fueron divididos al azar en entrenamiento, validación y prueba en grupos de 70%, 15% y 15% respectivamente. La primera red llamada red directa y la segunda red llamada red inversa consistió en una arquitectura 3: 6: 2 y 2: 6: 3 respectivamente. El número óptimo de neuronas en la capa oculta se obtuvo a través ensayo empírico y error con 4-12 neuronas. Finalmente, 6 neuronas han demostrado tener el mejor rendimiento óptimo. Debido a los datos de entrada de tamaño pequeño, el ampliamente método utilizado Levenberg-Marquardt (LM) se empleó para el algoritmo de aprendizaje.

La metodología aplicada fue la siguiente:

1. Preparar los datos de entrada (x) y salida (y) del diseño de experimentos para ser utilizados como datos de entrenamiento y de prueba. Asimismo, tener presente que se requieren tener valores de salida (yd) deseados, que son distintos de los experimentales.

2. Determinar los parámetros óptimos (x), construyendo la ANN 1 utilizando las salidas como entradas y viceversa, para ello se preparan los conjuntos de entrenamiento y prueba respectivos, se entrena la red. Luego en la red entrenada se ingresan los valores que se desea obtener (yd), como entradas; obteniéndose así valores de las (xo) variables de entrada optimizadas que permiten obtener las y deseadas.
3. Estimar los valores de respuesta (y) con las (xo) obtenidas en 2). Para ello se construye la ANN 2 con las entradas (x) iniciales y salidas iniciales (y); luego del entrenamiento respectivo se procede a ingresar los valores de (xo) obtenidos en 2) y así la ANN 2 permite obtener los valores de (y) (de predicción) que deberán compararse con los valores de (yd) deseados.

La tabla 14 muestra la combinación de niveles de factores que maximiza las respuestas mediante la técnica de redes neuronales artificiales. También muestra la combinación de factores a la cual se alcanza el óptimo.

*Tabla 14. Óptimos multi-respuesta, método Redes Neuronales Artificiales*

<i>Maximizar</i>	<i>Peróxido de hidrogeno (<math>X_1</math>)</i>	<i>Concentración del catalizador (<math>X_2</math>)</i>	<i>Respuesta</i>
Mineralización de contaminante ( $Y_1$ )	0,4103	5,4984	9,3089
Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ )			22,8376
Eliminación de contaminante ( $Y_3$ )			10,3357

Se calcula el GPE para redes neuronales artificiales

$$\text{GPE\_ANN} = 0.01626$$

## 7.2 Discusión

Para evaluar el rendimiento entre las metodologías aplicadas se aplica el error porcentual global, la metodología que menor GPE obtenga es la que más cerca se encuentra de los óptimos individuales, el GPE se expresa mediante la ecuación (30). El mejor modelo está dirigido a minimizar el GPE. La tabla 15 compara las distintas metodologías aplicadas a los datos propuestos

Tabla 15. Comparación de métodos multi-respuesta

	Factores		Respuestas			
	Dosis de peróxido de hidrógeno ( $H_2O_2$ )	Concentración del catalizador	Mineralización de contaminante: $Y_1$	Peróxido de hidrógeno que reaccionó: $Y_2$	Eliminación de contaminante: $Y_3$	
	mg $H_2O_2$ / mg COT	(g/L)	% de COT/gCat	% $H_2O_2$ que reaccionó/gCat	% decolorización/gCat	
OPTIMOS INDIVIDUALES	Optimo Global		Valores Estimados			GPE
	—	—	9,35370	22,76090	10,77330	
METODO	X1	X2	Y1	Y2	Y3	
DF	0,45295	5,96922	9,42000	20,13000	10,48000	0,05134
GDF	0,48066	5,44441	8,09729	22,52250	9,18309	0,09747
DEA	0,45177	5,92279	9,25794	20,27886	10,35665	0,05265
PCA	0,45384	5,86367	9,21493	20,45229	10,28246	0,05394
ANN	0,41030	5,49840	9,30890	22,83760	10,33570	0,01626

Los resultados experimentales y los datos pronosticados por los métodos propuestos se presentan en la Tabla 15. Además, se observó que el GPE para ANN tenía valores más bajos en comparación con la función de deseabilidad (DF), DEA (análisis envolvente de datos), PCA (análisis de componentes principales) y GDF (distancia generalizada) en todos los objetivos. Aunque la metodología de DEA y PCA parecen satisfactorios, la deseabilidad tuvo un GPE más bajo respecto a dichas metodologías, con respecto a la GDF es la metodología que más alejada se encuentra con respecto a los valores óptimos

individuales. Específicamente, en casos tal como Y1, Y2 o Y3, la mejora de la ANN es claramente más significativa en comparación a las otras metodologías.

Obviamente, en los tres objetivos, los valores predichos de la ANN tienen menos desviación de la línea de ajuste perfecto (experimental = predicho) en comparación a las técnicas comparadas. En conclusión, las técnicas de GDF, DEA, PCA y DF permite considerar interacciones sobre las variaciones de la respuesta y finalmente da una ecuación matemática que facilita las nuevas predicciones obtener. Mientras tanto, ANN proporciona un proceso para simular cualquier forma de no linealidad, Además, ANN es una técnica conocida ampliamente como un modelo de caja negra, se centra principalmente en el análisis de los datos disponibles en lugar de diseñar un sistema para lograr relaciones claras.

Para la optimización en las metodologías que generen un modelo, si sólo tenemos la condición óptima, la respuesta se calcula fácilmente mediante el modelo obtenido. Pero, en ANN también necesitamos el objetivo respectivo para iniciar el modelado proceso. Por lo tanto, un input supuesto (incluyendo variables y un valor objetivo) debe agregarse a los datos anteriores. En la primera etapa, los valores ANN son proporcionados por las ecuaciones cuadráticas obtenidas en el capítulo 5 y alimentados como preliminares estimar en la ANN. En la segunda etapa, todos los datos de entrada se dividen en subconjuntos de entrenamiento, validación y prueba y los se asignan datos adicionales al subconjunto de prueba. Dado que ANN ignora los objetivos de prueba y los crea de nuevo, se asigna un nuevo destino a los datos mencionados. De esta manera, la ANN podría utilizarse como un modelo predictivo.

En conclusión, los resultados experimentales y los datos pronosticados para las diferentes metodologías multi-respuesta propuestas se presentan en la Tabla 15. Cada técnica se evalúa mediante el error porcentual global (GPE), la predicción del método de las ANN muestra mejores resultados obteniendo un  $GPE = 0.01626$ , representando un error porcentual global de 1,62% seguido de la metodología de deseabilidad con un  $GPE = 0.04997$  que representa un error porcentual global de 4.99%, la metodología con mayor



GPE es la distancia generalizada con un porcentaje de 9,74%, mientras que las metodologías de análisis envolvente de datos y análisis de componentes principales presentan un comportamiento similar obteniendo un GPE de 5,36% y 5,39% respectivamente siendo así la metodología de ANN artificiales quien mejores resultados multi-respuesta presenta, aventajando a las otras metodologías que es una técnica adaptativa la cual permite realizar diferentes corridas de la red para ir minimizando el error.

## 8. Conclusiones

Este trabajo surgió por la necesidad de contar con un análisis de optimización multi-respuesta que permita obtener los mejores resultados para el mejoramiento de la calidad de agua en el departamento de Nariño, Por tanto, se aplicaron las técnicas de optimización multi-respuesta: función de deseabilidad (DF), Función de distancia generalizada (GDF), Análisis Envolvente de datos (DEA), Análisis de componentes principales (PCA) y redes neuronales artificiales (ANN), de cada técnica se evaluó la eficiencia con el fin de determinar el conjunto de valores de los factores controlables que permitieron la mejor combinación de respuestas para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH.

Los experimentos fueron diseñados por diseño central compuesto (CCD) y se realizó un análisis estadístico para cada respuesta (Mineralización de contaminante ( $Y_1$ ), Peróxido de hidrógeno que reacciona ( $Y_2$ ) y la eliminación de contaminante ( $Y_3$ ) y dos factores (dosis de peróxido de hidrogeno ( $X_1$ ) y la concentración del catalizador ( $X_2$ )). Se evaluaron los tratamientos para mejorar la calidad agua en el Departamento de Nariño. Se investigaron los efectos de dos variables de entrada; en tres variables de respuesta. con criterio de optimización de maximización para las tres respuestas.

Después de realizar la estimación de los modelos de regresión para cada una de las variables de todos los conjuntos de datos presentados en el capítulo 5 el siguiente paso fue proceder con la optimización simultánea. Dicha optimización conjunta se realizó haciendo uso de las técnicas de optimización multi-respuesta: Función de Deseabilidad, Análisis de Componentes Principales, Análisis envolvente de Datos y Redes Neuronales Artificiales. Para poder realizar una comparación entre los distintos métodos de optimización multi-respuesta fue necesario evaluar el rendimiento entre las metodologías aplicadas mediante el error porcentual global (GPE), la diferencia entre los valores más deseables para cada una de las variables de respuesta con los valores resultantes para dichas variables de la aplicación de los procedimientos aplicados.

Los resultados experimentales y los datos pronosticados para las diferentes metodologías multi-respuesta propuestas se evaluaron mediante el error porcentual global (GPE), la predicción del método de las ANN muestra mejores resultados obteniendo un  $GPE = 0.01626$ , representando un error porcentual global de 1,62% seguido de la metodología de deseabilidad con un  $GPE = 0.04997$  que representa un error porcentual global de 4,99%, la metodología con mayor GPE es la distancia generalizada con un porcentaje de 9,74%, mientras que las metodologías de análisis envolvente de datos y análisis de componentes principales presentan un comportamiento similar obteniendo un GPE de 5,36% y 5,39% respectivamente siendo así la metodología de las redes neuronales artificiales quien mejores resultados multi-respuesta presenta, aventajando a las otras metodologías debido a que es una técnica adaptativa la cual permite realizar diferentes corridas de la red para ir minimizando el error.

Este estudio ratifica la ventaja de lo propuesto por Tong y Hsieh en lo que se refiere a la metodología de trabajar con la Red Neuronal Inversa y luego con la Directa. Asimismo, la ventaja que tiene de trabajar con Redes Neuronales Artificiales frente a los otros métodos propuestos en el presente trabajo para la solución de problemas de optimización multi-respuesta.

Tampoco hay que olvidar que algunos de los métodos de optimización son susceptibles de mejora en cuanto a incorporar información o *probar distintas ponderaciones* a las variables respuestas, aunque este puede resultar en un trabajo difícil y se necesita de la experiencia del experto en el área de aplicación.

Aplicando Análisis de Componentes Principales los problemas de optimización multi-objetivo disminuyen la dimensionalidad en las variables respuestas y se trabaja con unas nuevas variables artificiales.

Las aplicaciones que se han desarrollado se hicieron con diseños central compuesto rotatable  $2^k$  pero es aplicado a cualquier otro diseño y a cualquier campos de las ciencias, donde se tenga  $k$  variables de entrada (factores) y  $m$  respuestas.

La función de deseabilidad (DF), la función de distancia generalizada, el Análisis envolvente de datos y el análisis de componentes principales se obtienen GPE similares. Con la técnica de optimización multi-respuesta, *redes neuronales artificiales*, se obtienen un GPE inferior con respecto a las otras técnicas.

## 9. Recomendaciones

- Los métodos de optimización multi-respuesta aplicados en este trabajo, excepto las redes neuronales proporcionan un GPE muy aproximado entre ellas, por lo cual se recomienda hacer el uso de dos métodos únicamente para su comparación, los más utilizados son la función de deseabilidad y el análisis de componentes principales.
- Tener en cuenta la técnica de Redes Neuronales Artificiales en las actividades de calidad, especialmente en lo referente a ingeniería de calidad; aspectos como los de diseño de productos, control y mejora de procesos y en los temas de calidad requieren del uso de herramientas más exactas.
- Aplicando por lo menos una técnica de optimización, para determinar el óptimo multi-respuesta se recomienda aplicar las redes neuronales artificiales para una mejor aproximación a los óptimos individuales y reducción del GPE.
- Es aconsejable realizar los algoritmos en MATLAB o en otro lenguaje de programación para cada técnica de optimización multi-respuesta, debido a que los paquetes estadísticos no contienen a todos ellos.
- Es necesario ampliar los algoritmos de las técnicas de optimización multi-respuesta para diseños central compuesto  $3^k$ . En nuestro trabajo las técnicas se corrieron para un diseño central compuesto  $2^k$  rotatable.
- En el artículo de Wang-Li, 2006 aplican una técnica de optimización multi-respuesta llamada *función de distancia generalizada de robustez*. Esta técnica es una transformación de la función de distancia generalizada la cual mediante un modelo de programación lineal no lineal analiza la sensibilidad del punto óptimo multi-respuesta. Esta técnica de Wang-li, 2006 la aplicaremos cuando se corran modelos centrales compuestos con variables independientes no controlables (covariables) en el proyecto de mejoramiento de la calidad de agua.
- Se recomienda ser muy riguroso en recolección de la matriz de diseño para que coincida con lo programado en los algoritmos realizados en MATLAB. En la parte

del Anexo A, se presenta los diagramas de flujo para el código en un lenguaje de programación para las técnicas de optimización multi-respuesta.

- La técnica de optimización multi-respuesta, PCA se aplicó el índice general multivariante, MGI, propuesto por Souza et al 2015, para el cual, antes de aplicar componentes principales a las respuestas o variables independientes realiza cocientes entre las respuestas con criterio de optimización de maximizar con cada una de las respuestas con criterio de optimización de minimizar. En el caso que todas las respuestas tengan el mismo criterio de optimización no hay necesidad de realizar dichos cocientes.
- La técnicas de optimización multi-respuesta, DEA, calcula una respuesta multivariante con las eficiencias, considerando como unidades de medida de decisión, DMUs a los tratamientos en el diseño central compuesto. Probamos con las supereficiencias, pero el GPE, se incrementa.
- Como última recomendación, se debe tener en cuenta que el comando *fmincon* de MATLAB, encuentra el mínimo de una función multivariante. En el caso que el criterio de optimización sea de maximizar, únicamente se cambia de signo a la función.
- Para aquellos lectores que necesiten otras aplicaciones de la comparación de las técnicas multi-respuesta, en el Anexo B se realizan dos aplicaciones adicionales.

## **10. Referencia bibliográficas**

- Andersen, P., Petersen, N.C., 1993. Un procedimiento para clasificar unidades eficientes en el análisis de envoltura de datos. *Science de Gestión* 39, 1261-1264.
- Banker, R.D., Conrad, R.F., Strauss, R.P., 1986. Una aplicación comparativa de análisis de envoltura de datos y métodos de translog: Un estudio ilustrativo de la producción hospitalaria. *Ciencias de la Gestión* 32-44.
- Bolch, B.W., Huang, C.T., 1974. *Métodos Estadísticos Multivariados para Negocios y Economía*. Prentice-Hall, Acantilados de Englewood, Nueva Jersey.
- Cevallos, Juan, 2004. Artículo "Aplicación de Redes Neuronales para Optimizar Problemas Multirespuesta en Mejora de la Calidad", publicado en *Industrial Data*, Volumen 7 N° 2.
- Charnes, A. Cooper, W.W., Li, S., 1989. Utilizando el análisis de envoltura de datos para evaluar la eficiencia en el desempeño económico de las ciudades chinas. *Planificación Socio-Económica* 23, 325-344.
- Charnes, A., Cooper, W.W., Rhodes, E., 1978. Medición de la eficiencia de las unidades de toma de decisiones. *Revista Europea de Investigación Operativa* 2, 429-444.
- Chiao, C.H. and Hamada, M. 2001. "Analyzing Experiments with Correlated multiple Responses". *JouANNI of Quality Tecnology*.
- Cornell, J.A. 1990 How to apply response Surface methodology. American Society for quality control .
- Damián Jorge Matich, 2001. *Redes Neuronales: Conceptos Básicos y Aplicaciones*, Cátedra: Informática Aplicada a la Ingeniería de Procesos – Orientación I, Rosario.
- Daniel. W.W., 1978. *Estadísticas no paramétricas aplicadas*. Houghton Mifflin Company, de Boston.
- De la Vara, R. y Domínguez, J, 1998. "Metología de Superficie de Respuesta".

Comunicación Técnica, I-90-08, CIMAT.

Del Castillo, E, 2007. "Process Optimization. A Statistic Approach". Editorial Springer. EEUU.

Del Castillo, E.; Montgomery, D. C. and McCarville, D. R. 1996. "Modified Desirability Functions for Multiple Response Optimization". *JouANNI of Quality Technology*.

Derringer, G. y R. Suich. (3) "Simultaneous Optimization of Several Response Variables", *JouANNI of Quality Technology*, vol. 12, pp. 214-219]

Derringer, G. y Suich, R, 1980. "Simultaneous Optimization of Several Response Variable". *Joul of Quality Technology*. Vol. 12, No 4.

Domínguez Domínguez Jorge, 2012. Optimización Estadística de procesos Multi-Respuesta.

Galeano Luis Alejandro 2011. Peroxidación catalítica de contaminantes orgánicos en medio acuoso utilizando una bentonita modificada con Al y Fe, Cu o Mn, Salamanca, España.

García, Hernán, 2017. "Análisis Multivariado de Datos". Notas de clase. Docente tiempo completo Udenar.

Gutierrez, Humberto y De La Vara Salzar, Román.2012. "Análisis y Diseño de Experimentos" Segunda Edición.

Instituto departamental de salud de Nariño - IDSN, 2013

Isasi Viñuela Pedro, Ines M. Galvan Leon. 2004. Redes neuronales artificiales, un enfoque práctico, Madrid.

Khuri A.I. and Conlon M, 1981. "Simultaneus Optimizati6n of Multiple Responses represented by Polynomial Regression Functions". *Technometrics* 23, pp 363-375.

Khuri, A. I. y J. A. Cornell 1996. *Response Surfaces, Designed and Analyses*. 2ª. Edición, Marcel Dekker, Nueva York.

Khuri, A. I. y J. A. Cornell. *Response Surfaces: Designed and Analyses*. 2ª. Edición,



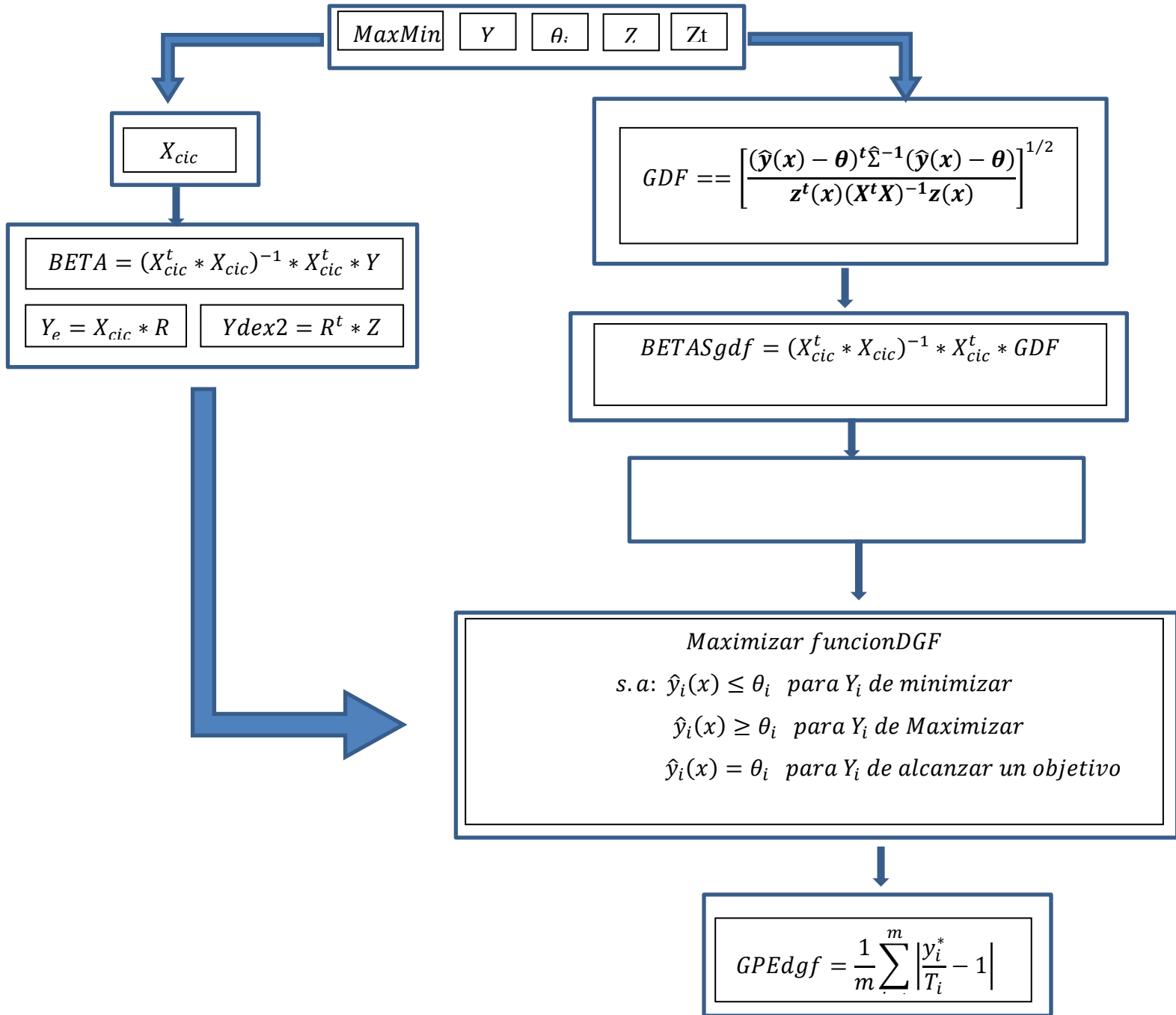
- Lee-Ing Tong y Kun-Li Hsieh, 2000. "A Novel mean of Applying Neural Networks to Optimize the Multirespons Problem". Quality Engineering, Vol. 13 No 1.
- Luz Vanessa Bacio Parra, 2007. "Optimización Multi-Objetivo en el Problema de Metodología de Superficie Multi-Respuesta" Tesis para obtener el grado de Maestría en Ciencias con Especialidad en Probabilidad y Estadística, Guanajuato, Gto., México,
- Montgomery, Douglas. 2004. "Diseño y análisis de experimentos". Editorial Limusa Wiley.
- Myers, R. H. and Montgomery, D. C. 1995. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments. John Wiley & Sons, New York
- Paiva Anderson Paulo, 2006. Multivariate response surface methodology: a correlated multiresponse optimization proposal for manufacturing process. PhD dissertation, Federal University of Itajuba, Brazil, p 243.
- Peña, Daniel, 2002. "Análisis de Datos Multivariantes".
- Peñuela, Cesar, 2016 "Programación No Lineal". Notas de clase. Docente tiempo completo UTP.
- Xabier Basogain Olabe, 2007. Redes neuronales artificiales y sus aplicaciones Escuela Superior de Ingeniería de Bilbao, EHU
- RH. Meyers, D.C. Montgomery, 2009. Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments (Wiley Series in Probability and Statistics), Wiley, New York.
- Souza Rocha Luiz Célio, Paiva Anderson Paulo and Balestrassi Pedro Paulo, 2006. Comparing DEA and Principal Component analysis in the multiobjective optimization of P\_GRAW process.
- Vera Luciana Candiotti, De Zan Maria M., Cámara Maria S., Goicoechea Hector C., 2014. Experimental design and multiple response optimizations using the desirability function in analytical methods development.

Wang Jing and Li Yongfan, 2016. A Robustness Generalized Distance Function  
Approach for Multiresponse Robust Optimization.

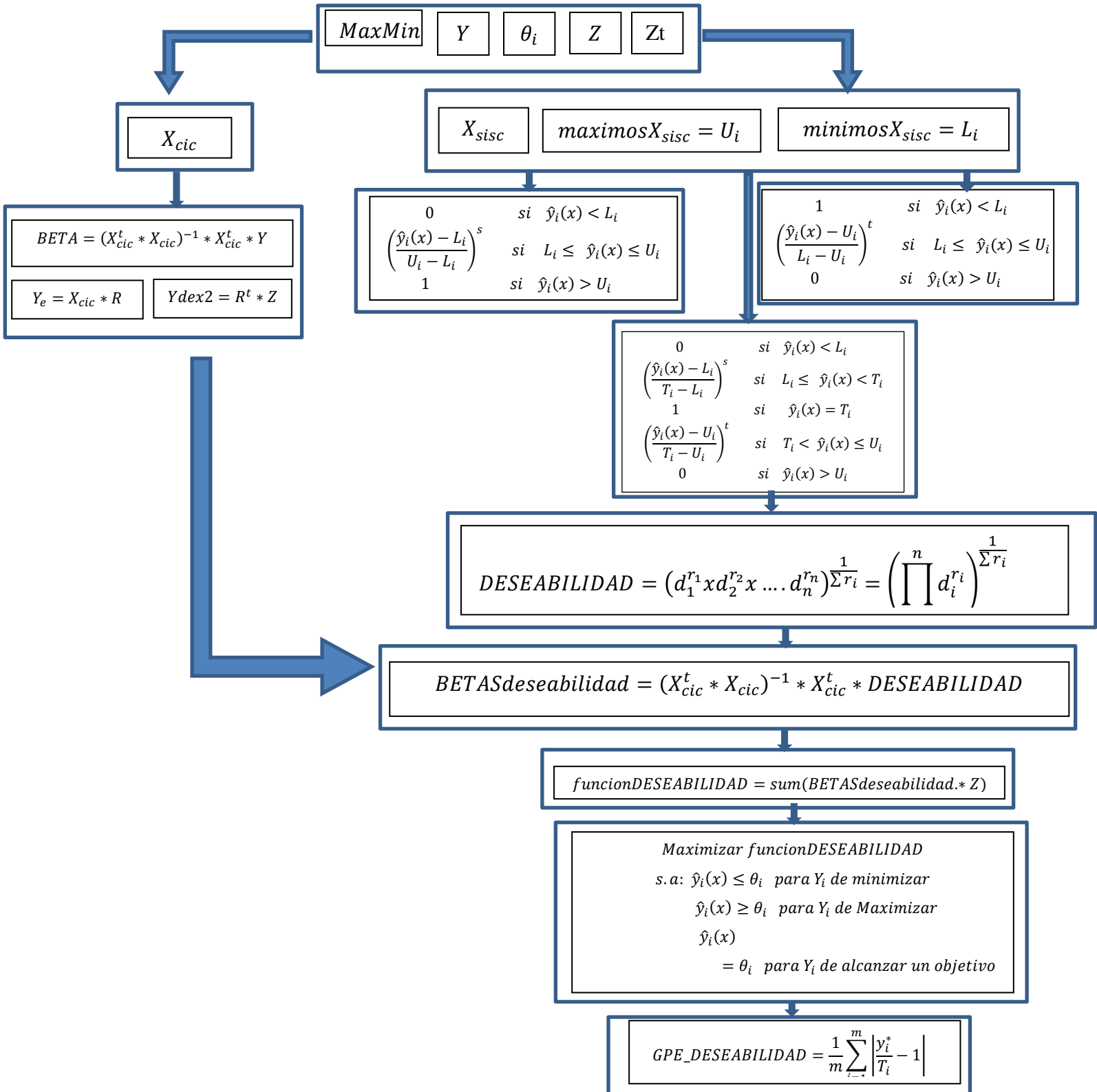
## Anexo A

Diagramas de flujo aplicados a cada metodología.

### FUNCION DE DISTANCIA GENERALIZADA



# FUNCION DE DESEABILIDAD



# ANALISIS ENVOLVENTE DE DATOS "EFICIENCIAS"

MaxMin Y  $\theta_i$  Z Zt

$X_{cic}$

$X_{estConMedDestaCI}$

EFICIENCIA

$$BETA = (X_{cic}^t * X_{cic})^{-1} * X_{cic}^t * Y$$

$$Y_e = X_{cic} * R \quad Ydex2 = R^t * Z$$

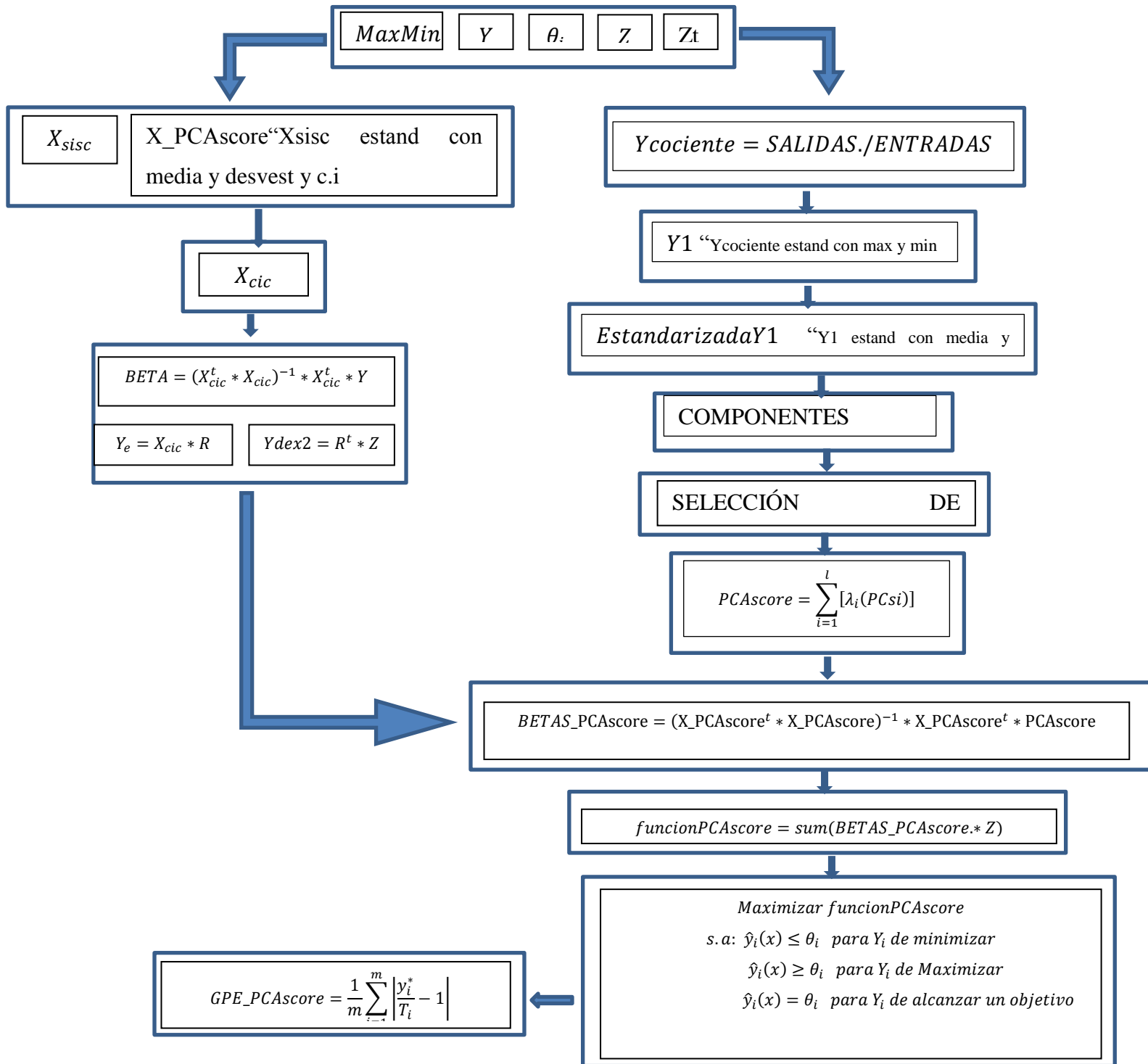
$$BETASefic = (X_{estConMedDestaCI}^t * X_{estConMedDestaCI})^{-1} * X_{estConMedDestaCI}^t * EFICIENCIAS$$

$$funcionEFICIENCIAS = sum(BETASsuperefic.* Z)$$

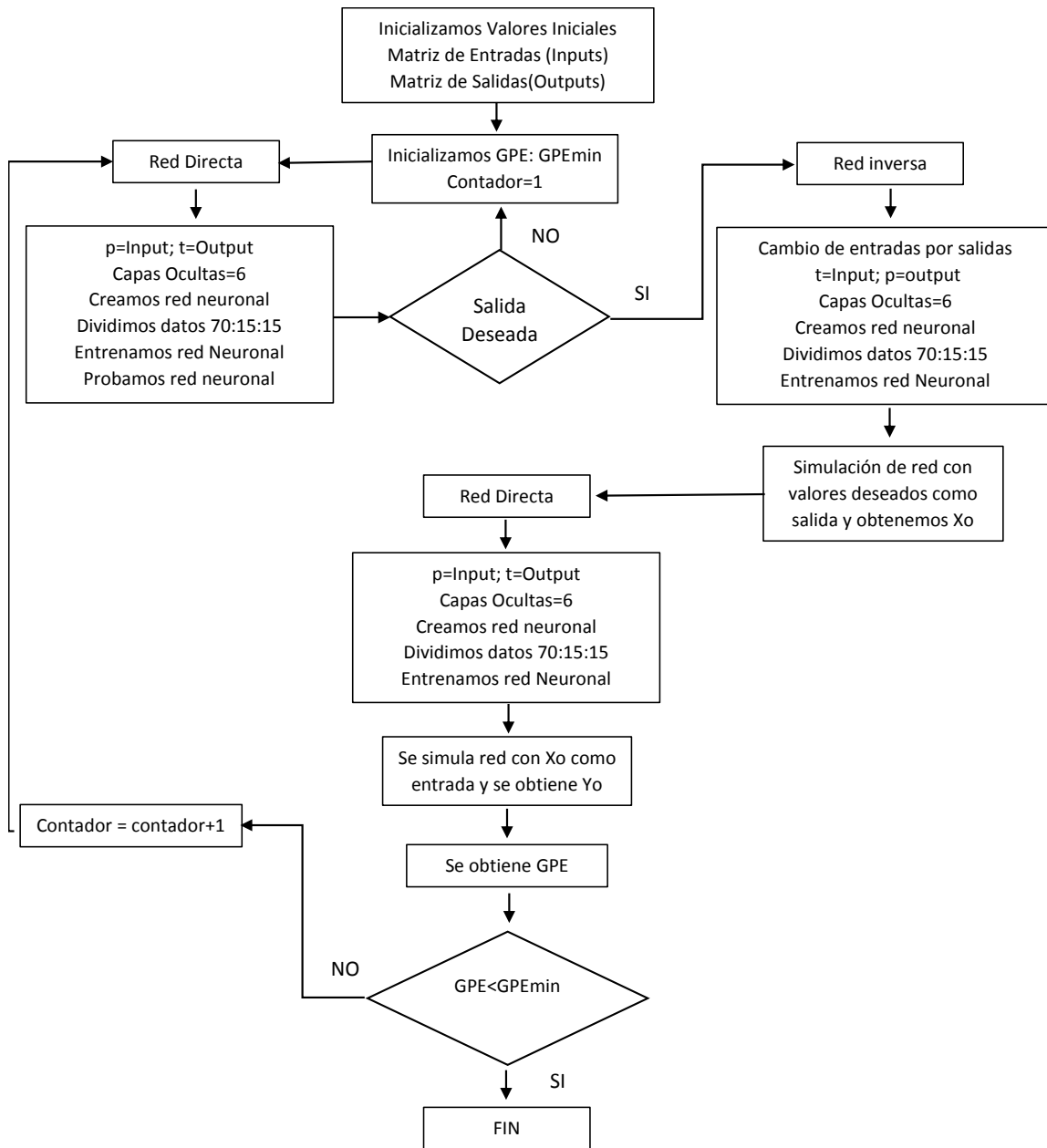
Maximizar funcion EFICIENCIAS  
s. a:  $\hat{y}_i(x) \leq \theta_i$  para  $Y_i$  de minimizar  
 $\hat{y}_i(x) \geq \theta_i$  para  $Y_i$  de Maximizar  
 $\hat{y}_i(x) = \theta_i$  para  $Y_i$  de alcanzar un objetivo

$$GPEeficiencias = \frac{1}{m} \sum \left| \frac{y_i^*}{T_i} - 1 \right|$$

# ANALISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES "PCAscore"



## REDES NEURONALES ARTIFICIALES



## Anexo B.

### Aplicación 2

Se trabajó el diseño central compuesto rotatable  $2^2$  con 8 puntos centrales "SLURRY" propuesto por los ingenieros químicos del proyecto de mejoramiento de la calidad de agua en la Udenar.

Se investigaron los efectos de dos variables de entrada; la cantidad de catalizador ( $X_1$  "C\_cat"), el peróxido de hidrogeno ( $X_2$  "H2O2") en dos variables de respuesta. Las variables de respuesta con criterio de optimización de maximización son: COT\_elim ( $Y_1$ ), H2O2\_reac ( $Y_2$ ). La configuración de diseño en las variables originales y los datos de respuesta múltiple se dan a continuación

			max	max
	C_cat	H2O2	COT_elim	H2O2_reac
No	$X_1$	$X_2$	$Y_1$	$Y_2$
1	4,68	1,7	18,76	39,32
2	7,56	1,7	23,76	58,78
3	4,68	2,7	22,34	39,27
4	7,56	2,7	27,2	42,32
5	3,24	2,2	18,23	41,21
6	9	2,2	24,2	55,2
7	6,12	1,2	18,78	79,2
8	6,12	3,3	30,2	35,82
9	6,12	2,2	46,72	65,23
10	6,12	2,2	37,34	58,74
11	6,12	2,2	30,4	42,34
12	6,12	2,2	40,72	68,92
13	6,12	2,2	48,01	72,34
14	6,12	2,2	28,2	48,52
15	6,12	2,2	41,22	66,34
16	6,12	2,2	16,2	32,76



Una característica importante de este diseño es que las estimaciones de las respuestas se obtienen mediante modelos NO significativos y  $R^2_{ajustado}$  inferiores al 60%. También en este diseño no se tiene variables respuestas de minimización. Al aplicarle las diferentes técnicas de optimización se obtuvo los resultados que se indican en la tabla a.

*Tabla a. Comparación de las diferentes técnicas de optimización multi-respuesta mediante el GPE (Error Porcentual Global) para “SLURRY”.*

	Factores		Respuestas		
	Concentración del catalizador $X_1$	Dosis de peróxido de hidrógeno $X_2$ ( $H_2O_2$ )	Eliminación de contaminante: $Y_1$	Peróxido de hidrógeno que reaccionó: $Y_2$	
	(g/L)	mg $H_2O_2$ / mg COT	% decolorización/gCat	% $H_2O_2$ que reaccionó/gCat	
OPTIMOS INDIVIDUALES	Optimo Global		Valores Estimados		GPE
METODO	X1	X2	Y1	Y2	
FD	6,68897	2,1292	34,4298	57,7174	0,1074
GDF	8,1032	2,03946	28,5014	60,3262	0,1719
DEA	7,0407	1,5693	26,1780	70,3115	0,1335
PCA	7,2026	1,6011	26,3898	70,2447	0,13097
ANN	8,002	2,3863	37,974	85,591	0,032

Donde se observa que el menor GPE se obtuvo con las redes neuronales artificiales, seguida de la función de deseabilidad el análisis de componentes principales, análisis envolvente de datos y la función de distancia generalizada es la que obtuvo mayor error porcentual global.

### Aplicación 3

Se trabajó el ejercicio 7.5 propuesto en el libro de Khuri-Cornell, 1996. Se evaluaron los tratamientos de lavado para mejorar la calidad de la carne molida de salmonete. Se investigaron los efectos de tres variables de entrada; la temperatura de lavado ( $X_1$ ), el tiempo de lavado ( $X_2$ ) y la relación de lavado ( $X_3$ ) en cuatro variables de respuesta. Las variables de respuesta son: maximizar la elasticidad ( $Y_1$ ), minimizar el ácido tiobarbitúrico (TBA) ( $Y_2$ ), minimizar el porcentaje de pérdida de cocción ( $Y_3$ ) y maximizar el índice de blancura ( $Y_4$ ). La configuración de diseño en las variables originales y los datos de respuesta múltiple se dan a continuación:

No	X1	X2	X3	Y1	Y2	Y3	Y4
1	26	2,8	18	1,83	29,31	29,50	50,36
2	40	2,8	18	1,73	39,32	19,40	48,16
3	26	8,2	18	1,85	25,16	25,70	50,72
4	40	8,2	18	1,67	40,81	27,10	49,69
5	26	2,8	27	1,86	29,82	21,40	50,09
6	40	2,8	27	1,77	32,20	24,00	50,61
7	26	8,2	27	1,88	22,01	19,60	50,36
8	40	8,2	27	1,66	40,02	25,10	50,42
9	21,227	5,5	22,5	1,81	33,00	24,20	29,31
10	44,773	5,5	22,5	1,37	51,59	30,60	50,67
11	33	0,95916	22,5	1,85	20,35	20,90	48,75
12	33	10,041	22,5	1,92	20,53	18,90	52,70
13	33	5,5	14,932	1,88	23,85	23,00	50,19
14	33	5,5	30,068	1,90	20,16	21,20	50,86
15	33	5,5	22,5	1,89	21,72	18,50	50,84
16	33	5,5	22,5	1,88	21,21	18,60	50,93
17	33	5,5	22,5	1,87	21,55	16,80	50,98

Una característica importante de este ejemplo es que todas las estimaciones de las respuestas se obtienen mediante modelos altamente significativos y  $R^2_{ajustado}$  superiores al 80%.

Al aplicarle las diferentes técnicas de optimización se obtuvo los resultados que se indican en la tabla b.

*Tabla b. Comparación de métodos multi-respuesta para el ejercicio 7.5 de Khuri-Cornel, 1996.*

	Factores			Respuestas				
	La temperatura de lavado $X_1$	El tiempo de lavado $X_2$	La relación de lavado $X_3$	Elasticidad $Y_1$	Acido Tiobarbitúrico (TBA) $Y_2$	Porcentaje de pérdida de cocción. $Y_3$	Índice de blancura $Y_4$	
				maximizar	minimizar	minimizar	maximizar	
OPTIMOS INDIVIDUALES	Óptimo Global			Valores Estimados				GPE
METODO	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$Y_1$	$Y_2$	$Y_3$	$Y_4$	
DF	29,6244	9,1611	26,4156	1,9262	19,6275	17,3594	50,9839	
FDG	29,8876	9,3971	25,8295	1,9246	19,5351	17,5470	51,3123	0,02572
DEA	31,7485	8,3213	25,2742	1,9029	20,2234	17,7733	51,7044	0,03904
PCA	30,5405	7,9017	25,2874	1,9144	19,5228	17,3262	50,6657	0,02757
ANN	31,0867	9,54193	22,1202	1,8978	19,133	16,7342	55,7635	0,0176

Donde se observa que el menor GPE se obtuvo con las redes neuronales artificiales, seguido de la función de la deseabilidad, la función de la distancia generalizada, el análisis de componentes principales y el análisis envolvente de datos obtuvo el mayor GPE. Se nota en este caso que con las cinco técnicas de optimización multi-respuesta se obtienen valores muy bajos en el GPE y además son valores muy similares.

## **Anexo C.**

### Revisión 1

1. Título del artículo: Optimización multirespuesta para mejora de la calidad. Comparación de enfoque clásico con el enfoque bayesiano y el de redes neuronales
2. Autores del artículo: Juan Cevallos Ampuero
3. Fecha de publicación del artículo: 26/02/13
4. Objetivo de artículo : El objetivo del trabajo es revisar las metodologías existentes sobre optimización multirespuesta, e integrarlas en una sola y desarrollar un nuevo algoritmo que permita superar las limitaciones existentes. La hipótesis es que se puede desarrollar un algoritmo nuevo para un nuevo modelo de optimización de procesos con varias respuestas, con relaciones no lineales, con estadística bayesiana y redes neuronales.
5. Resumen: El trabajo tiene por objetivo revisar las metodologías existentes sobre optimización multirespuesta, integrarlas en una sola y desarrollar un nuevo algoritmo que permita superar las limitaciones existentes. Para tal efecto se revisaron las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta tradicional, con diseño robusto; seguidamente se revisó la aplicación del enfoque bayesiano a lo obtenido con la estadística tradicional; y finalmente se revisaron aplicaciones de redes neuronales artificiales a casos de optimización. Luego de realizar el análisis y discusión sobre el tema se integró las tres metodologías en una sola, habiendo desarrollado un nuevo algoritmo que permite superar las limitaciones y deficiencias de los métodos anteriores. Asimismo, se compararon los resultados obtenidos con otros métodos con los que se obtendrían con el nuevo método, siendo resultado favorable. Por tanto se ha desarrollado una metodología de optimización multirespuesta que considera relaciones lineales y no lineales, que tiene las cualidades de las metodologías de la estadística tradicional, la estadística bayesiana, y las redes neuronales artificiales.
6. Análisis crítico del documento con el siguiente esquema

<b>Modelo presentado en el artículo</b>	<b>Modelo propuesto en este trabajo de investigación</b>
Realiza revisión sobre metodologías existentes para la optimización multirespuesta e integrarlas en una sola.	Se utilizaran diferentes métodos de optimización multirespuesta y se consideraran los que se acerquen a los valores más aceptables o más deseables de las respuestas estudiadas, además de medir le eficiencia técnica en cada una de ellas.
Se revisaron las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta tradicional, con diseño robusto; seguidamente se revisó la aplicación del enfoque bayesiano a lo obtenido con la estadística tradicional; y finalmente se revisaron aplicaciones de redes neuronales artificiales	Se Utilizaran las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta , se aplicaran diferentes técnicas de optimización multirespuesta como la función de deseabilidad, DEA, análisis factorial y la aplicación de redes neuronales, al finalizar se realizará una análisis y una discusión sobre las metodologías aplicadas y se evaluara la eficiencia de los procesos de optimización multi-respuesta a través de un indicador
Para cada método utiliza casos presentados en diversos artículos académicos y textos comparando las repuestas con las obtenidas por los diferentes autores mencionados	Se utilizara el caso específico de parámetros para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH y se aplicara a cada uno de los métodos de optimización multirespuesta y

	posteriormente se estudiara y definirá y evaluara las eficiencias en los procesos de optimización multi-respuesta a través de un indicador.
--	---

#### 7. Criterio de búsqueda

- Metabuscador o Base de Datos o Revistas Científicas: Google
- Frase Lógica: "Optimización multirespuesta para mejora de la calidad del agua"
- Dirección (URL) encontrada:  
<http://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/idata/article/viewFile/6369/5579>

#### Revisión 2

1. Título del artículo: Aplicación de redes neuronales para optimizar problemas multirespuesta en mejora de la calidad
2. Autores del artículo: Juan Cevallos Ampuero
3. Fecha de publicación del artículo: Diciembre de 2004
4. Objetivo de artículo : El objetivo del artículo trata sobre la aplicación de redes neuronales en problemas multirespuesta para el mejoramiento de la calidad.
5. Resumen: El artículo trata sobre la aplicación de redes neuronales en problemas multirespuesta para el mejoramiento de la calidad, a partir de un análisis conceptual se establece una aplicación que demuestra la eficacia de las redes neuronales utilizando la red backpropagation con entrenamiento, mediante el algoritmo backpropagation - traingdm.

6. Análisis crítico del documento con el siguiente esquema

<b>Modelo presentado en el artículo</b>	<b>Modelo propuesto en este trabajo de investigación</b>
Realiza revisión sobre problemas multirespuesta y solución estadística y lo compara con un problema multirespuesta y solución con redes neuronales	Se utilizaran diferentes métodos de optimización multirespuesta (función de deseabilidad, DEA, análisis factorial y la aplicación de redes neuronales) y se consideraran los que se acerquen a los valores más aceptables o más deseables de las respuestas estudiadas, además de medir la eficiencia técnica en cada una de ellas
Se revisaron las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta tradicional mediante una nueva función de deseabilidad "Modified Desirability Functions for Múltiple response Optimization", publicado por Del Castillo, Montgomery y McCarville, del Journal of Quality Technology, Vol. 28, N° 3. Y aplicando redes neuronales compara los mismos datos con la metodología sugerida por Lee-Ing Tong y kun- Lin Hsieh, en su artículo "A Novel mean of Applying Neural Networks to Optimize the Multireponse Problem", publicado en el	Se Utilizaran las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta , se aplicaran diferentes técnicas de optimización multirespuesta como la función de deseabilidad, DEA, análisis factorial y la aplicación de redes neuronales, al finalizar se realizará una análisis y una discusión sobre las metodologías aplicadas y se evaluara la eficiencia de los procesos de optimización multi-respuesta a través de un indicador

Quality Engineering, Vol.13.	
<p>Para cada método utiliza los mismos datos en este caso Del Castillo et al. (1996), presentan un ejemplo aplicativo sobre una faja transportadora metálica para calentamiento y adhesión de conductores de circuitos integrados en placas de plástico. Se comparan las respuestas obtenidas en cada método y aplica redes con BP y los siguientes algoritmos de entrenamiento: Basic gradient descent traingd, Basic gradient wit momentum traingdm, Adaptive rate traingdx, Resilient BP trainrp, Fletcher - Reeves conjugate gradient algorithm, traincgf, Powell - Beale conjugate gradient algorithm traincgb, Polak - Ribiere conjugate gradient algorithm traincgp, Scaled conjugate gradient algorithm trainscg, BFGS quasi - Newton meted trainbfg, One sep secant method trainoss, Leven - Marquart algorithm trainlm, Bayesian regularization trainbr y newgrnn, La arquitectura que dió los mejores resultados fue similar a la recomendada por Tong y Hsieh (redes neuronales BP, con arquitectura 6-5-3 para la Red Inversa y 3-5-6 para la Red Directa.</p>	<p>Se utilizara el caso específico de parámetros para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH y se aplicara a cada uno de los métodos de optimización multirespuesta</p> <p>Para la metodología multirespuesta y solución con redes neuronales sea aplicaran las diferentes redes para obtener el resultado, si no se llega a la solución con una red se deberá probar otro algoritmo de los que hay desarrollados (en la actualidad pasan de los 20).</p> <p>La de mejor resultado será comparada con las otras metodologías convencionales para la solución de problemas multirespuesta y se elegirá la que permita llegar a los valores más cercanos al objetivo, y posteriormente se estudiara y definirá y evaluara las eficiencias en los procesos de optimización multi-respuesta a través de un indicador.</p>



## 7. Criterio de búsqueda

- Metabuscador o Base de Datos o Revistas Científicas: ScienceDirect
- Frase Lógica: "(“optimization model” OR “optimization process” OR “Optimize” OR “optimisation model” OR “optimisation process”) AND (“neural network”) AND (“multiple response”)"
- Dirección (URL) encontrada:  
[http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/indata/Vol7\\_n2/Pdf/a05.pdf](http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtualdata/publicaciones/indata/Vol7_n2/Pdf/a05.pdf)

### Revisión 3

1. Título del artículo: Multiple response optimization of the coagulation process for upgrading the quality of effluent from municipal wastewater treatment plant
2. Autores del artículo: Na Li, Yi Hu, Yong-Ze Lu, Raymond J. Zeng & Guo-Ping Sheng
3. Fecha de publicación del artículo: 18 May 2016
4. Objetivo de artículo : El objetivo de este estudio fue desarrollar un método de optimización multirespuestas mediante un diseño experimental integrada UDRSM para el proceso de coagulación para mejorar la calidad del efluente de una depuradora. Para este propósito, el coagulante PFC fue utilizado y los parámetros de coagulación en términos de la dosis de coagulante, pH y basicidad se optimizaron a través de un diseño experimental UDRSM integrado y un enfoque de optimización multirespuestas. Se evaluó la calidad de los efluentes después de la optimización del proceso de coagulación en términos del nivel de V estándar de la clase de las aguas superficiales de China. Se prevé que la nueva estrategia de optimización utilizado en este estudio puede proporcionar un enfoque útil para otros sistemas complicados en el campo ambiental.
5. Resumen: Para cumplir con el estándar de calidad del agua de los efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales se utilizó el proceso de coagulación utilizando cloruro de polyferric (PFC), con un Diseño Uniforme (UD) acoplado con

la metodología de superficie de respuesta (RSM) que se adoptó para evaluar los efectos de los principales factores de influencia en la calidad : la dosis de coagulante, pH y basicidad, en la eliminación de carbono orgánico total (TOC),  $NH_4 + -N$  y  $PO_4^{3-} - P$  para mejorar la calidad del efluente en la aplicación práctica.

Las condiciones operativas optimizadas fueron: dosis 28 mg / L, pH 8,5 y basicidad 0.001. Los correspondientes rendimientos de eliminación de TOC,  $NH_4 + -N$  y  $PO_4^{3-} - P$  fueron 77,2%, 94,6% y 20,8%, respectivamente. Más importante aún, la calidad del efluente podría actualizar a agua Clase V de la superficie a través de China bajo la coagulación región óptima. Además, el análisis relacional gris (GRA) prioridad a estos tres factores como: pH> basicidad> dosificación (por TOC), basicidad> dosificación> pH (por  $NH_4 + -N$ ), pH> dosificación> basicidad (por  $PO_4^{3-} - P$ ), lo que ayudaría a identificar el factor más importante para controlar la eficiencia del tratamiento de diversos índices de calidad del efluente de PFC coagulación.

#### 6. Análisis crítico del documento con el siguiente esquema

Modelo presentado en el artículo	Modelo propuesto en este trabajo de investigación
Desarrolla un método de optimización multirespuestas mediante un diseño experimental para mejorar la calidad del efluente de una depuradora de plantas de tratamiento de aguas residuales en china.	Además de desarrollar un método de optimización multirespuestas mediante un diseño experimental se utilizaran diferentes métodos de optimización multirespuesta (función de deseabilidad, DEA, análisis factorial y la aplicación de redes neuronales) para el mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la

	tecnología de oxidación avanzada PCFH en el departamento de Nariño
<p>Se desarrolló un método de optimización multirespuestas mediante un diseño experimental integrada UDRSM para el proceso de coagulación para mejorar la calidad del efluente de una depuradora. Para este propósito, el coagulante PFC fue utilizado y los parámetros de coagulación en términos de la dosis de coagulante, pH y basicidad se optimizaron a través de un diseño experimental UDRSM integrado y un enfoque de optimización multirespuestas, mediante la función de deseabilidad</p> <p>Se evaluó la calidad de los efluentes después de la optimización del proceso de coagulación en términos del nivel de V estándar de la clase de las aguas superficiales de China</p>	<p>Se Utilizaran las metodologías de optimización estadística mediante metodología de superficie de respuesta tradicional, adicional se aplicaran diferentes planteamientos de optimización multirespuesta función de deseabilidad, DEA, análisis factorial y la aplicación de redes neuronales , al finalizar se realizará una análisis y una discusión sobre las metodologías aplicadas.</p>
<p>Se realizó un diseño Uniforme (UD) acoplado con la metodología de superficie de respuesta (RSM) en donde los principales factores de influencia son : la dosis de coagulante, pH y basicidad, y como respuestas a optimizar se consideraron la eliminación de carbono</p>	<p>La de mejor resultado será comparada con las otras metodologías convencionales para la solución de problemas multirespuesta y se elegirá la que permita llegar a los valores más cercanos al objetivo, y posteriormente se estudiara y definirá y evaluara las</p>

<p>orgánico total (TOC), el <math>NH_4 + -N</math> y <math>PO_4^{3-} - P</math> para mejorar la calidad del efluente en la aplicación práctica.</p> <p>Las condiciones operativas optimizadas fueron: dosis 28 mg / L, pH 8,5 y basicidad 0.001. Los correspondientes rendimientos de eliminación de TOC, <math>NH_4 + -N</math> y <math>PO_4^{3-} - P</math> fueron 77,2%, 94,6% y 20,8%, respectivamente</p>	<p>eficiencias en los procesos de optimización multi-respuesta a través de un indicador. Aquí las variables de entrada y respuestas que se trabajaran específicamente en el proyecto de investigación:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Factores: cantidad de peróxido, hierro, catalizador</li> <li>– Covariables: Ph, temperatura, COT.</li> <li>– Respuestas: Mineralización, ph, color, turbiedad, peróxido de reacción, hierro eliminado,</li> </ul>
--	---

#### 7. Criterio de búsqueda

- Metabuscador o Base de Datos o Revistas Científicas: ScienceDirect
- Frase Lógica: (“wáter quality”) AND (“optimization model” OR “optimization process” OR “Optimize” OR “optimisation model” OR “optimisation process”) AND (“multiple response”)
- Dirección (URL) encontrada: <https://www.nature.com/articles/srep26115>

#### Revisión 4

1. Título: Comparing DEA and principal component analysis in the multiobjective optimization of P-GMAW process
2. Autor: Luiz C. S. Rocha, Anderson P. Paiva, Emerson J. Paiva, Pedro P. Balestrassi.
3. Fecha de publicación: 02/04/2015
4. Objetivo de artículo: Comparar dos enfoques en las entradas y salidas múltiples en la evaluación de unidades de toma de decisiones (DMUs) mediante Análisis Envolvente de Datos (DEA) y Análisis de Componentes Principales (PCA).

5. Resumen: La optimización de un proceso de fabricación multi-respuesta no es una tarea trivial. Muchos autores han tratado de superar las dificultades particulares observadas en esta área de conocimiento explorando los poderosos mecanismos presentes en una gran cantidad de técnicas como el diseño de experimentos, la metodología de superficie de respuesta (RSM), el análisis de componentes principales (PCA) y la programación matemática. En este sentido, este trabajo presenta un enfoque híbrido alternativo, que combina RSM y análisis envolvente de datos (DEA), una popular técnica de programación lineal útil para comparar la eficiencia de las unidades de toma de decisiones.

La idea básica es optimizar un conjunto de múltiples respuestas correlacionadas de un proceso de fabricación bien definido utilizando DEA como un algoritmo para generar la función objetivo singular. Esta propuesta alternativa se compara con la metodología de superficie de respuesta multivariable, un enfoque estocástico basado en el PCA, una técnica estadística multivariante empleada generalmente con diseños de respuesta múltiple de Taguchi. Dado que un gran número de procesos de fabricación presenta conjuntos de múltiples respuestas correlacionadas, se presenta aquí un estudio de caso basado en cinco características de calidad de un proceso de soldadura por pulsos de GMAW para ilustrar el rendimiento comparativo de dos propuestas. Los resultados indican respuestas cercanas para ambos métodos. A pesar de esto, la DEA se consideró mejor porque sus resultados son mayores en parámetros que queríamos maximizar y son menores en parámetros que queríamos minimizar. Todas las restricciones establecidas no fueron violadas en ambos casos de DEA.

6. Análisis crítico del documento:

<b>Modelo presentado en el artículo</b>	<b>Modelo propuesto en este trabajo de investigación</b>
Compara dos enfoques en las entradas y salidas múltiples en la evaluación de unidades de toma de decisiones (DMUs) mediante Análisis Envolvente de Datos (DEA) y Análisis de Componentes Principales (PCA).	Se aplicara la función de pérdida múltiple para determinar el modelo más eficiente entre DEA y PCA y también se comparará con la función de deseabilidad y redes neuronales.
Se presentan 13 ciudades costeras y cinco zonas económicas especiales Chinas en 1989, para caracterizar la tecnología de esas ciudades y zonas.	Se aplicará las dos técnicas: DEA y PCA para diseños de experimentos obtenidos en laboratorios en el análisis del mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH
Los rankings de DEA y PCA se comparan usando las medidas de correlación de Spearman y Kendall's (Daniel, 1978). Para comparar la adecuación de los modelos utiliza el error porcentual global (GPE).	Se usará la función de pérdida múltiple para analizar la eficiencia de los métodos.

7. Criterio de búsqueda:

- Ingreso a las bases de datos de la UTP.
- Ingreso a la bases de datos :Scopus.
- Palabra de búsqueda; DEA and multivariate.

- Frase Lógica: " DEA and multivariate "
- Dirección (URL) encontrada:  
[https://www.researchgate.net/publication/276087488\\_Comparing\\_DEA\\_and\\_principal\\_component\\_analysis\\_in\\_the\\_multiobjective\\_optimization\\_of\\_P-GMAW\\_process](https://www.researchgate.net/publication/276087488_Comparing_DEA_and_principal_component_analysis_in_the_multiobjective_optimization_of_P-GMAW_process)

## Revisión 5

1. Título: Optimización estadística de procesos multi-respuesta.
2. Autor: Jorge Domínguez Domínguez.
3. Fecha de publicación:
4. Objetivo: Definir un conjunto de factores que proporcionen la mejor mediación simultánea de las respuestas.
5. Resumen: Se presenta el modelo de optimización multi-objetivo utilizando métodos de programación lineal para obtener un óptimo global. También se presentan varios planteamientos de optimización que reducen el problema de multi-respuesta a una función simple. Se consideran cinco funciones simples para encontrar el óptimo global, y se utilizan técnicas gráficas como complementos de optimización para resaltar soluciones alternativas. Se hace una evaluación comparativa de los resultados que se alcanzaran a través de las cinco funciones. Dentro de estas cinco funciones que se estudian, una se plantea en el contexto de la lógica difusa. La estrategia de esta presentación consiste en hacer el planteamiento teórico del tema a tratar e ilustrar mediante ejemplos.
6. Análisis crítico del documento:

<b>Modelo presentado en el artículo</b>	<b>Modelo propuesto en este trabajo de investigación</b>
Describe métodos para optimización con	Se creara el algoritmo en Gams o en

una respuesta: El método de programación cuadrática, el método de Lagrange, el método simplex de Nelder-Mead.	Matlab para los métodos de optimización con una respuesta.
Se realizan diferentes planteamientos de optimización multi-respuesta: Función de deseabilidad, Modelo de optimización mult-objetivo difuso, Función de distancia generalizada, función de pérdida múltiple. El concepto TOPSIS.	Se ampliara con análisis envolvente de datos (DEA) y análisis de componentes principales (PCA).
Hace dos aplicaciones: una en la elaboración de un queso y la otra en el mejoramiento del desempeño en las bandas de las llantas.	Se aplicara las diferentes técnicas para diseños de experimentos obtenidos en laboratorios en el análisis del mejoramiento de la calidad de agua potable mediante la tecnología de oxidación avanzada PCFH

#### 7. Criterio de búsqueda:

- Metabuscador o Base de Datos o Revistas Científicas: Google
- Frase Lógica: “Técnica multivariantes”